



SKRIPSI –TK141581

**EKSPERIMEN DAN ESTIMASI KESETIMBANGAN FASA
UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT
 $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(MDEA+DEA)-H}_2\text{O}$**

Oleh :

**Achmad Sani Zahid
2311100158**

**Anandita Priscarini
2311100188**

**Dosen Pembimbing :
Dr. Ir. Kuswandi, DEA
NIP. 1958 06 12 1984 03 1003
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng.
NIP. 1963 01 22 1987 01 1001**

**JURUSAN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI
INSTITUT TEKNOLOGI SEPULUH NOPEMBER
SURABAYA 2015**



SKRIPSI –TK141581

**EXPERIMENT AND ESTIMATION OF VAPOR-LIQUID
EQUILIBRIA FOR ELECTROLYTE SOLUTION OF
 $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(MDEA+DEA)-H}_2\text{O}$**

Project By :

**Achmad Sani Zahid
2311100158**

**Anandita Priscarini
2311100188**

Advisors :

**Dr. Ir. Kuswandi, DEA
NIP. 1958 06 12 1984 03 1003
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng.
NIP. 1963 01 22 1987 01 1001**

**DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING
FACULTY OF INDUSTRIAL TECHNOLOGY
SEPULUH NOPEMBER INSTITUTE OF TECHNOLOGY
SURABAYA 2015**

LEMBAR PENGESAHAN

" EKSPERIMEN DAN ESTIMASI KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR LARUTAN ELEKTROLIT $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(MDEA+DEA)-H}_2\text{O}$ "

Diajukan untuk Memenuhi Salah Satu Syarat Memperoleh Gelar
Sarjana Teknik pada Program Studi S-1 Jurusan Teknik Kimia
Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya

Oleh :

Achmad Sani Zahid
Anandita Priscarini

2311100158
2311100188

Disetujui oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Dr. Ir. Kuswandi, DEA. (Pembimbing 1)
2. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng. (Pembimbing 2)
3. Prof. Ir. Renanto, MSc, Ph.D. (Penguji I)
4. Dr. Widiyastuti, ST, MT. (Penguji II)
5. Prida Novarita T., ST, MT. (Penguji III)



SURABAYA,
JULY 2015

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

EKSPERIMEN DAN ESTIMASI KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O

Nama Mahasiswa : 1) Achmad Sani Zahid (2311 100 158)
2) Anandita Priscarini (2311 100 188)
Jurusan : Teknik Kimia, FTI-ITS
Dosen Pembimbing : 1) Dr. Ir. Kuswandi, DEA
2) Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng.

ABSTRAK

Berbagai teknologi proses penghilangan gas CO₂ dari campuran gas telah dikembangkan. Salah satu metode penghilangan gas CO₂ yang banyak diaplikasikan dalam industri adalah metode pemisahan absorpsi reaktif (absorpsi dengan reaksi kimia) dengan menggunakan pelarut yang mengandung absorbent reaktif seperti senyawa alkanolamine (MEA, DEA, TEA dan MDEA).

Data kesetimbangan fase uap-cair sistem CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O dibutuhkan untuk perancangan yang rasional dan operasi yang optimal dari unit CO₂ removal. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fase uap-cair CO₂ eksperimen didalam larutan K₂CO₃ dengan promotor (MDEA+DEA) pada suhu 30°C-50°C dengan tekanan atmosferik. Variasi komposisi yang digunakan adalah 30% K₂CO₃, 0-5% MDEA, 0-5% DEA, gas umpan CO₂ 5-20%. Hasil eksperimen kemudian dikorelasikan dengan model elektrolit-NRTL. Pada percobaan digunakan metode analogi N₂O dikarenakan solubilitas gas tidak dapat diukur secara langsung.

Hasil dari eksperimen menunjukkan bahwa harga konstanta henry meningkat seiring dengan kenaikan suhu 30-50°C. Selain itu, dengan promotor yang sama semakin meningkatkannya konsentrasi CO₂ serta suhu operasi juga dapat meningkatkan tekanan parsial gas CO₂. Sementara itu meningkatnya konsentrasi

CO₂ pada gas umpan juga akan meningkatkan besarnya CO₂ loading rata-rata sebesar 13,75% untuk 10% CO₂ umpan dan 41,92% untuk 20% CO₂ umpan. Hasil korelasi dengan E-NRTL memberikan nilai \neg Average Absolute Relative Deviation (AARD) sebesar 4,84%.

Kata kunci : kesetimbangan fase uap-cair, model elektrolit-NRTL, sistem CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O, solubilitas

EXPERIMENT AND ESTIMATION OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR ELECTROLYTE SOLUTION OF CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O

Student's Name : 1) Achmad Sani Zahid (2311 100 158)
2) Anandita Priscarini (2311 100 188)
Department : Chemichal Engineering, FTI-ITS
Advisors : 1) Dr. Ir. Kuswandi, DEA
2) Prof. Dr. Gede Wibawa, M. Eng.

ABSTRACT

There are many technologies to remove CO₂ from natural gas that have been developed. One of methods that used in industries is absorption with chemical reaction using solvent which is containing reactive absorbent such as alkanoamine compounds (MEA, DEA, TEA, and MDEA).

The data of vapor-liquid equilibria phase of system CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)- H₂O is needed for rational design and optimal operation condition from CO₂ removal unit. This experiment aims to determine vapor-liquid equilibrium of CO₂ experiment using 30% K₂CO₃ solution with mixture promotor of (MDEA+DE) at temperature 30-50°C on atmospheric pressure. Diversities of compositions that had been used were 30% K₂CO₃, 0-5% MDEA, and 0-5% DEA, feed gas of CO₂ 5-20%. The results of experiments are corelated by electrolyte-NRTL. N₂O analogy is used on experiment beacuse the solubility of gas can not determine directly.

The results of experiments show that Henry numbers rose slightly as the increase of temperature 30-50°C. In other hand, with same promotor that used, the higher concentracion of CO₂ and operation temperature will increase the partial pressure of CO₂. Whilst the higher concentration of CO₂ in feed gas also can increase the value of CO₂ loading with average results at 13,75% of 10% CO₂ feed gas, and 41,92% of 20% CO₂ feed gas. The

corelation results with E-NRTL give the Average Absolute Relative Deviation (AARD) 4,84%.

Key Word : Electrolyte-NRTL models, CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O system, solubility, vapor-liquid phase equilibria

KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur kehadiran Allah SWT karena atas berkat, Rahmat, dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan laporan skripsi yang berjudul :

**” EKSPERIMEN DAN ESTIMASI KESETIMBANGAN
FASA UAP-CAIR LARUTAN ELEKTROLIT
CO₂-K₂CO₃-(MDEA+DEA)-H₂O”.**

Dalam menyusun proposal skripsi ini, kami mendapatkan bantuan berupa dorongan spiritual, sumbangan pikiran, maupun material dari berbagai pihak. Pada kesempatan kali ini, kami mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA selaku Dosen Pembimbing kami,
2. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. selaku Dosen Pembimbing kami dan kepala laboratorium Thermodinamika,
3. Dosen Penguji yang telah memberikan saran dan kritik,
4. Bapak Setiyo Gunawan, ST, Ph.D selaku Sekretaris Jurusan Teknik Kimia ITS,
5. Bapak dan Ibu Dosen pengajar serta seluruh karyawan Jurusan Teknik Kimia,
6. Orang Tua dan keluarga kami atas segala doa dan dukungan,
7. Teman-teman seperjuangan di Lab Thermodinamika Teknik Kimia ITS yang lucu yakni Wahud, Rizal, Vito, Pakcik, Dian, Clara, Ayok, Kimi, Hezron, Hadi, Cindy, Rasyid, Edwin, Andre, Mas Ginting, Mbak Evi, Mbak Risha, Mas Randi, Mas Polar, dan Mbak Arina,
8. Cak To yang banyak membantu,
9. Teman-teman angkatan K51 yang telah memberikan banyak support dan bantuan,
10. Semua pihak yang telah membantu penyelesaian laporan skripsi ini yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Kami menyadari bahwa pembuatan laporan kami ini masih jauh dari sempurna, dengan segala kerendahan hati kami mengharapkan saran dan kritik untuk perbaikan laporan ini.

Surabaya, Juli 2015

Penyusun

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	v
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	ix
KATA PENGANTAR	xi
DAFTAR ISI.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR TABEL.....	xvii
BAB I.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian.....	5
1.4 Manfaat Penelitian	5
BAB II.....	7
2.1 Metode Absorpsi	7
2.1.1 Absorpsi Kimia	7
2.1.2 Absorpsi Fisika	8
2.2 Keseimbangan Fase.....	9
2.3 Hukum <i>Henry</i>	11
2.4 Keseimbangan Reaksi Kimia.....	12
2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)	14
2.5.1 Long Range Forces	15
2.5.2 Persamaan Born	16
2.5.3 NRTL Term Sebagai Kontribusi Local Composition.....	17
2.6 Parameter Interaksi Pada Model E-NRTL	23
2.7 Metode GRG (Generalized Reduced Gradient) Non-linear	24
BAB III	27
3.1 Deskripsi Penelitian	27
3.2 Peralatan Penelitian.....	27
3.3 Bahan Penelitian.....	29
3.4 Variabel Penelitian.....	29
3.5 Pelaksanaan Penelitian.....	29
3.5.1 Persiapan Penelitian	29

3.5.2	Prosedur Penelitian	30
3.5.3	Diagram Alir Metodologi Penelitian.....	30
3.6	Evaluasi Data.....	33
BAB IV	37
4.1	Hasil Validasi Peralatan Penelitian.....	37
4.2	Hasil Eksperimen dan Pembahasan	38
a.	Solubilitas CO ₂ secara Fisik	38
b.	Solubilitas CO ₂ secara Kimia	40
4.3	Korelasi dengan Model E-NRTL	45
BAB V	55
DAFTAR PUSTAKA	57
DAFTAR NOTASI	61
APENDIKS	63
LAMPIRAN	117

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Parameter Interaksi Molekul-Molekul	23
Tabel 3.2 Parameter Interaksi Molekul-Pasangan Ion dan Pasangan Ion-Molekul	24
Tabel 4.1 Hasil Validasi Peralatan Penelitian	37
Tabel 4.2 Hasil Perhitungan CO ₂ Terabsorp pada suhu 30°C	41
Tabel 4.3 Hasil Perhitungan CO ₂ Terabsorp pada suhu 40°C	41
Tabel 4.4 Hasil Perhitungan CO ₂ Terabsorp pada suhu 50°C	42
Tabel 4.5 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 0-5%	46
Tabel 4.6 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 1-4%	47
Tabel 4.7 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 2-3%	47
Tabel 4.8 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 3-2%	48
Tabel 4.9 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 4-1%	48
Tabel 4.10 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 5-0%	49
Tabel A.1 Hasil Perhitungan Massa Tiap Komponen Untuk 1% Massa MDEA dan 4% Massa DEA	64
Tabel A.2 Perhitungan Mol N ₂ O Terabsorb tiap %MDEA dan %DEA	65
Tabel A.3 Hasil Perhitungan Konstanta Henry N ₂ O dan CO ₂ tiap %MDEA dan %DEA	67
Tabel A.4 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan	70
Tabel A.5 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Awal Untuk 20% Mol CO ₂ pada suhu 30°C	71
Tabel A.6 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan	74
Tabel A.7 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 20% Mol CO ₂ pada suhu 30° C	74
Tabel A.8 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk CO ₂ 5% N ₂ 95% pada suhu 30° C	79
Tabel A.9 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	80

Tabel A.10 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	81
Tabel A.11 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	81
Tabel A.12 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	82
Tabel A.13 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	82
Tabel A.14 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 5% N ₂ 95%	83
Tabel A.15 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	83
Tabel A.16 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	84
Tabel A.17 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	84
Tabel A.18 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	85
Tabel A.19 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	85
Tabel A.20 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 10% N ₂ 90%	86
Tabel A.21 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	86
Tabel A.22 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	87

Tabel A.23 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	87
Tabel A.24 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	88
Tabel A.25 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	88
Tabel A.26 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas CO ₂ 20% N ₂ 80%	89
Tabel A.27 Hasil Perhitungan Ci Untuk 1% MDEA 4% DEA	90
Tabel A.28 Data Nonrandomness Parameter	91
Tabel A.29 Data Konstanta Binary Interaction Parameter antar Molekul- Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem MDEA-DEA	92
Tabel A.30 Perhitungan <i>Binary Interaction Parameter</i> (Molekul:CO ₂)	100
Tabel A.31 Perhitungan <i>Binary Interaction Parameter</i> (Molekul:H ₂ O)	101
Tabel A.32 Perhitungan <i>Binary Interaction Parameter</i> (Molekul:MDEA).....	102
Tabel A.33 Perhitungan <i>Binary Interaction Parameter</i> (Molekul:DEA)	103
Tabel A.34 Data Konstanta <i>Binary Interaction Parameter</i> antar Molekul	104
Tabel A.35 Perhitungan <i>Binary Interaction Parameter</i> antar Molekul	106
Tabel A.36 Perhitungan Koefisien Aktivitas H ₂ O	114
Tabel A.37 Perhitungan Koefisien Aktivitas CO ₂	115

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 Skema Peralatan Penelitian	28
Gambar 3.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian	31
Gambar 3.3 Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E- NRTL	32
Gambar 4.1 Hasil Validasi Peralatan Eksperimen	38
Gambar 4.2 Konstanta Henry CO ₂ pada 30% K ₂ CO ₃ dan 0-5% MDEA- DEA.....	39
Gambar 4.3 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 0-5%.....	42
Gambar 4.4 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 1-4%.....	43
Gambar 4.5 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 2-3%.....	43
Gambar 4.6 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 3-2%.....	44
Gambar 4.7 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 4-1%.....	44
Gambar 4.8 Grafik Hubungan CO ₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 5-0%.....	45
Gambar 4.9 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA- DEA 0-5%.....	50
Gambar 4.10 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA- DEA 1-4%.....	51
Gambar 4.11 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA- DEA 2-3%.....	51
Gambar 4.12 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA- DEA 3-2%.....	52

Gambar 4.13 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA-DEA 4-1%.....	52
Gambar 4.14 Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading dengan Promotor MDEA-DEA 5-0%.....	53

DAFTAR NOTASI

A_ϕ	Parameter Debye-Huckel
C	Konsentrasi (mol/L)
D_i	Konstanta Dielektrik spesies i
D_s	Konstanta Dielektrik pelarut
D_m	Konstanta Dielektrik campuran pelarut
D_w	Konstanta Dielektrik air
e	Muatan elektron
G	Energi Gibbs
G^{ex}	Energi Gibbs eksek
G^{id}	Energi Gibbs ideal
ΔG^0	Perubahan energi Gibbs
H_{CO_2}	Konstanta Henry CO ₂ di larutan
$H^o_{CO_2}$	Konstanta Henry CO ₂ di air
H_{N_2O}	Konstanta Henry N ₂ O di larutan
$H^o_{N_2O}$	Konstanta Henry N ₂ O di air
ΔH^0	Perubahan entalpy reaksi standard
I_x	Daya ionik
k	Konstanta Boltzmann
K	Konstanta kesetimbangan
N_o	Bilangan Avogadro
P^s_w	Tekanan uap air (Pa)
P	Tekanan total (Pa)
p	Tekanan parsial (Pa)
R	Konstanta gas ideal (J.K ⁻¹ .mol ⁻¹)
T	Temperatur (K)
$\bar{v}^\infty_{m,w}$	Parsial molar volume <i>solute</i> m (m ³)
v^l_w	Parsial molar volume untuk air murni (m ³)
V	Volume (m ³)
x	Fraksi komponen di liquid
y	Fraksi komponen di vapor
z	Muatan ion

Huruf Latin

α	Parameter nonrandomness
f_i	fugasitas komponen i
\hat{f}_i	Fugasitas komponen i dalam campuran
ϕ	Koefisien Fugasitas
ϕ_w^s	Koefisien Fugasitas air jenuh pada temperatur sistem
ρ_s	Densitas pelarut (Kg/m ³)
ξ	Fraksi volume i sekitar pusat molekul
ρ	Parameter pendekatan model PDH yang terdekat
γ	Koefisien aktivitas
τ	Parameter interaksi biner

DAFTAR PUSTAKA

- Altway, S. dan Marhetha, K. D. Prediksi Solubilitas Gas CO₂ di Dalam Larutan Potasium Karbonat dan MDEA Menggunakan Model Elektrolit UNIQUAC. *Skripsi, Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember*. **2010**.
- Altway, S, Kuswandi, dan A.Altway. Prediction of Gas-Liquid Equilibria of CO₂-K₂CO₃-MDEA-H₂O System by Electrolyte UNIQUAC Model. *IPTEK Journal of Engineering*. **2014**, 1, 1.
- Austgen, D.M., Rochelle, G.T., Peng, X. and Chen, C.C. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems Using the Electrolyte-NRTL Equation. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1989**, 28, 1060-1073.
- Austgen, D.M., Rochelle, G.T., Peng, X., and Chen, C. C. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems. 2. Representation of H₂S and CO₂ Solubility in Aqueous MDEA and CO₂ Solubility in Aqueous Mixtures of MDEA with MEA or DEA. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1991**, 30, 543-555.
- Arora, J. S. *Introduction to Optimum Design*, 3rd ed.; Academic Press: USA. **2012**, 567-569.
- Chen, C.C. and Evan L. B. A Local Composition Model for the Excess Gibbs Energy of Aqueous Electrolyte Systems. *AIChE Journal* **1986**, 32.
- Chen, C.C. and Song, Y. Solubility Modeling with Nonrandom Two-Liquid Segment Activity Coefficient Model. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, 43, 8354.

- Clarke, J. K. A. Kinetics of Absorption of Carbon Dioxide In Monoethanolamine Solutions at Short Contact Times. *Ind. Eng. Chem. Fundamental* **1964**, 3.
- Devries, N. P. CO₂ Absorption into Concentrated Carbonate Solution with Promotors at Elevated Temperatures. *Thesis, University of Illinois*, **2014**.
- Ghosh, U. K., Kentish, S. E., and Stevens, G. W. Absorption of Carbon Dioxide into Aqueous Potassium Carbonate Promote by Boric Acid. *Energy Procedia I* **2009**, 1075–1081.
- Haimour, N. and O.C. Sandall. Absorption of Carbon Dioxide Into Aqueous Methyl-diethanolamine. *Chem. Eng. Science* **1984**, 39.
- Jou, F. Y., Mather, A. E., and Otto, F. D. Solubility of H₂S and CO₂ in Aqueous Methyl-diethanolamine Solutions. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1982**, 21, 539-544.
- Kim, C. J., Palmer, A. M., and George E. Milliman. Absorption of Carbon Monoxide into Aqueous Solutions of K₂CO₃, Methyl-diethanolamine, and Diethylethanolamine. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1988**, 27, 324-328.
- Kurniati, Y., Altway, A., dan Kuswandi. Eksperimental Penentuan Keseimbangan Uap-Cair dalam Sistem Larutan Elektrolit CO₂-K₂CO₃-MDEA+DEA-H₂O. *Prosiding Seminar Nasional Teknik Kimia “Kejuangan”*. **2014**.
- Kuswandi, K. A. dan Y.P. Laksana. Solubilitas Gas CO₂ dalam Larutan Potassium Karbonat. *Jurnal Teknik Kimia, Universitas Pembangunan Nasional*. **2008**.

- Lee, Seungmoon; Song, Ho-Jun; Maken, Sanjeev; Park, Jong-Jin; Park, Won-Jin. Physical Solubilities and Diffusivity of N_2O and CO_2 in Aqueous Solutions of Sodium Glycinate. *Journal of Chemical Engineering Data* **2006**, 51, 504-509.
- Liu, Y., L. Zhang, S. Watanasiri. Representing Vapor-Liquid Equilibrium for an Aqueous MEA- CO_2 . *Ind. Eng. Chem. Res.* **1999**, 38.
- Lin P., dan D.S.H Wong, Carbon dioxide capture and regeneration with amine/alcohol/water blend. *International Journal of Greenhouse Gas Control* **2014**, 26, 69–75.
- Pemerintah Republik Indonesia. Blueprint Pengelolaan Energi Nasional 2006-2025. Jakarta
- Polasek, J. and Bullin, J.A. “*Selecting amines for Sweetening Units in Gas Processors Association (GPA) Regional Meeting, “Process Considerations in Selecting Amine”*”, Tulsa, Oklahoma, **1994**.
- Rahimpour, M.R, Reza, R.H., and Talaghatb, M.R. Mathematical modeling of carbon dioxide removal using amine-promoted hot potassium carbonate in a hollow fiber membrane contractor. *Journal of Natural Gas Science and Engineering* **2014**, 18, 274-285.
- Versteeg, G. F., van Swaaij, W. P. M., Solubility and Diffusivity of Acid Gases (CO_2 , N_2O) in Aqueous Alkanolamine Solutions. *J Chem Eng Data.* **1988**, 33, 29-34.
- Wilson, G.M. Vapor-Liquid Equilibrium. XI. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing. *Contribution From*

The Department Of Chemistry, Massachusetts Institute Of Technology. 1964.

Zulfetra, I. dan Nuharani, F. Eksperimen dan Estimasi Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Larutan Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-MDEA-DEA}$ dan $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-PZ-DEA}$. *Skripsi, Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember. 2014.*

BIODATA PENULIS



Achmad Sani Zahid adalah anak kedua dari tiga bersaudara pasangan bapak Zainal Abidin dan ibunda Nur Hidayati. Penulis dilahirkan di Ujung Pandang pada tanggal 15 Juli 1993. Jenjang pendidikan yang ditempuh dimulai dari TK Bustanul Atfal Surabaya, SD Dharma Patra P. Brandan, SMPN 1 Bogor, dan SMAN 5 Bogor. Setelah lulus SMA, penulis terpilih dalam seleksi penerimaan mahasiswa baru ITS pada jurusan Teknik

Kimia FTI-ITS Surabaya dan merupakan bagian dari Teknik Kimia angkatan 2011 (K-51). Selain aktif sebagai mahasiswa, penulis juga aktif dalam berbagai organisasi kemahasiswaan yaitu sebagai Pimpinan Bidang Dana dan Usaha BKKMTKI Daerah IV dan staff PRC HIMATEKK FTI-ITS. Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di TOTAL E&P Indonesia Balikpapan. Sedangkan pada tahun terakhir perkuliahan, penulis memilih Laboratorium Termodinamika sebagai laboratorium yang menjadi spesialisasinya. Penulis menyelesaikan tugas desain pabrik yang berjudul “Pra Desain Pabrik (*Subtitute Natural Gas*) SNG dari *low rank coal*” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Keseimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(MDEA+DEA)-H}_2\text{O}$ ” dengan Dosen Pembimbing bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis sangat terbuka untuk menerima kritik dan saran yang dapat dikirimkan melalui email: achmadsaniz@yahoo.com.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BIODATA PENULIS



Anandita Priscarini Agus, lahir di Padang pada tanggal 08 Maret 1994, merupakan anak pertama dari pasangan Bapak Agus Boing dan Ibu Riny Muchtar. Penulis memulai pendidikan di TK Semen Padang, SD Pertiwi 3 Padang, kemudian melanjutkan sekolah ke SMP Kartini II Batam dan SMA Don Bosco Padang. Setelah lolos SNMPTN 2011, penulis melanjutkan kuliah tahap sarjana di Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS) Surabaya, dan tergabung dalam angkatan 2011 (K-51). Semasa kuliah, penulis juga aktif dalam kegiatan organisasi kemahasiswaan yaitu aktif dalam departemen Emission (Event Management Division) sebagai koordinator sponsorship. Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di PT Pupuk Sriwidjaja, Palembang pada bulan Juni-Juli 2014. Memasuki tahun terakhir diawali dengan bergabung sebagai anggota Laboratorium Themodinamika Teknik Kimia ITS. Penulis menyelesaikan “Pra Desain Pabrik (*Subtitute Natural Gas*) SNG dari *low rank coal*” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Keseimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(MDEA+DEA)-H}_2\text{O}$ ” dengan Dosen Pembimbing bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis sangat terbuka dalam menerima kritik dan saran, dapat menghubungi penulis lewat email: ananditapriscarini@yahoo.com

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Gas alam dan minyak bumi adalah sumber daya yang memiliki manfaat sangat besar dalam memenuhi kebutuhan energi manusia. Manfaat yang besar dari gas alam dan minyak bumi menyebabkan kebutuhan gas alam dan minyak bumi meningkat tiap tahun. Indonesia merupakan negara yang memiliki cadangan gas alam yang cukup besar. Dalam kondisi harga minyak bumi yang fluktuatif dengan kebutuhan energi yang semakin meningkat, maka gas alam menjadi energi alternatif yang sangat dibutuhkan. Berdasarkan *Blueprint Pengelolaan Energi Nasional 2006-2025*, kebutuhan energi dengan sumber gas alam akan meningkat dan menjadi alternatif bersama dengan batubara.

Sebagai alternatif energi utama, kualitas gas alam juga penting untuk diperhatikan. Harga produk gas alam juga diharapkan dapat bersaing, untuk itulah dibutuhkan pemurnian gas alam dari kontaminan dapat mempengaruhi harga gas alam. Kontaminan yang biasanya terdapat pada gas alam adalah Hg, Sulfur, air, CO₂, N₂, dan He (kadang-kadang).

Gas CO₂ merupakan campuran gas yang bersifat asam. Campuran gas asam dihasilkan dari proses dalam industri seperti industri petrokimia, industri gas alam. Adanya uap air akan mengasamkan CO₂ menjadi H₂CO₃ yang sangat korosif. Di samping itu gas CO₂ dapat mengurangi nilai kalor dari gas alam. Pada industri gas alam (LNG), gas CO₂ yang merupakan komponen dari gas alam dapat menimbulkan persoalan dalam proses pencairan gas. Gas CO₂ dapat membeku pada suhu rendah sehingga dapat menimbulkan penyumbatan pada sistem perpipaan dan dapat mengganggu pada peralatan-peralatan proses. Oleh karena itu gas CO₂ perlu dipisahkan sebelum dilakukan proses-proses lebih lanjut.

Berbagai teknologi proses penghilangan gas CO₂ dari campuran gas telah dikembangkan. Salah satu metode penghilangan gas CO₂ yang banyak diaplikasikan dalam industri adalah metode pemisahan absorpsi reaktif (absorpsi dengan reaksi kimia) dengan menggunakan pelarut yang mengandung absorben reaktif seperti karbonat (K₂CO₃) atau senyawa alkanolamine (MEA, DEA, TEA dan MDEA).

Polasek dan Bullin, 1990, melakukan simulasi absorpsi CO₂ dan H₂S menggunakan pelarut MDEA dan campuran *amine*. Hasil simulasi menunjukkan bahwa pelarut DEA lebih selektif terhadap CO₂. Simulasi absorpsi CO₂ dalam campuran pelarut MEA/MDEA dan DEA/MDEA juga telah diteliti oleh peneliti lain. Hasil penelitian tersebut menjelaskan bahwa MDEA mempercepat reaksi DEA, tetapi tidak mempercepat reaksi MEA terhadap CO₂.

Selain menggunakan pelarut *amine*, penggunaan pelarut kalium karbonat (K₂CO₃) untuk proses pemisahan CO₂ juga masih sering digunakan karena kelarutan CO₂ terhadap karbonat/bikarbonat cukup tinggi dan biayanya murah (Rahimpour *et al.* 2004), tetapi reaksinya berlangsung relatif lambat yang mengakibatkan kecepatan transfer massa rendah sehingga membutuhkan kontak permukaan yang besar. Untuk mempercepat laju absorpsi ditambahkan katalis (promotor) ke dalam larutan K₂CO₃. Promotor yang digunakan umumnya adalah senyawa *amine*, piperazine, asam borat, dll. Selain itu, kalium karbonat digunakan karena harganya murah, kapasitasnya besar, penggunaan yang mudah, dan murah diregenerasi (Ghosh *et al.* 2009).

Menurut Kim *et al.* 2000, amina primer (MEA) adalah penyerap CO₂ yang paling baik, namun ditemukan bahwa penggunaan konsentrasi MEA yang tinggi justru tidak berpengaruh signifikan terhadap penambahan daya absorpsi CO₂. Amina sekunder (DEA) memiliki potensi serap yang juga baik, namun tidak sebaik MEA. Sedangkan untuk amina tersier (MDEA) daya penyerapannya sangat lemah. Dari keterbatasan kemampuan penyerapan pelarut tunggal ini, dapat diketahui bahwa pelarut

campuran dari dua senyawa amina memiliki kemampuan penyerapan yang lebih baik dibanding penggunaan pelarut tunggal (Lin dan Wong, 2009). Sehingga penelitian ini bertujuan untuk menguji kemampuan absorpsi pelarut campuran amina MDEA dengan DEA. Karakteristik perpindahan massa akibat variasi amine yang dilakukan menjadi aspek utama dalam bahasan selanjutnya. Dengan memperhatikan hal tersebut maka akan diperoleh perbandingan yang paling cocok untuk menjadi pelarut dalam proses absorpsi.

Lee *et al.* 2006, mempelajari kelarutan fisik dan difusivitas N_2O dan CO_2 dengan larutan *sodium glycinate* dengan berbagai fraksi massa pada suhu yang berbeda. Kelarutan fisik dan difusivitas N_2O dan CO_2 dalam air murni didapatkan dari data literatur. Kelarutan fisik menurun dengan meningkatnya fraksi massa *sodium glycinate* dan dengan peningkatan suhu, sedangkan difusivitas menurun secara linear dengan peningkatan fraksi massa *sodium glycinate* dan meningkat dengan penurunan suhu.

Kuswandi *et al.* 2008, melakukan penelitian mengenai data solubilitas gas CO_2 dalam larutan *Potassium Carbonate* (K_2CO_3) untuk meningkatkan kerja proses absorpsi. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan *wetted wall column* sebagai absorber dari berbagai konsentrasi *Potassium Carbonate* yaitu 10,15,20,25 dan 30% massa dan suhu operasi 30,40,50 dan 60°C. Perhitungan estimasi menggunakan persamaan *vapour liquid equilibria* (VLE) dan reaksi kimia metode NRTL. Hasil penelitian menunjukkan penurunan jumlah mol CO_2 yang terlarut dengan naiknya suhu serta konsentrasi larutan *Potassium Carbonate*.

Ghosh *et al.* 2009, menunjukkan bahwa penambahan asam borat ke dalam larutan *Potassium Carbonate* dapat meningkatkan jumlah CO_2 yang terserap. Dalam percobaannya, suhu juga sangat berpengaruh.

Menurut Zulfetra dan Nuharani, 2014, pelarut K_2CO_3 -PZ-DEA dapat mengabsorpsi gas CO_2 lebih baik dibandingkan dengan campuran pelarut K_2CO_3 -MDEA-DEA. Hal ini dikarenakan

pelarut K_2CO_3 -PZ-DEA memiliki nilai tekanan parsial lebih kecil jika dibandingkan dengan pelarut K_2CO_3 -MDEA-DEA.

Menurut Kurniati *et al.* 2014, adanya MDEA (1%) dan DEA (0-3%) dalam larutan dapat meningkatkan konstanta Henry sehingga dengan kata lain MDEA-DEA dapat menurunkan kelarutan CO_2 dalam larutan.

Altway *et al.*, 2014, melakukan prediksi dengan pelarut K_2CO_3 -MDEA- H_2O . Didapatkan bahwa jumlah penambahan MDEA dapat meningkatkan besarnya loading dari CO_2 dan menurunkan tekanan parsial CO_2 dalam gas keluaran.

1.2 Perumusan Masalah

Potassium carbonate (K_2CO_3) memiliki panas regenerasi yang rendah, tetapi laju reaksinya lambat bila dibandingkan dengan amine. Penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa penambahan amine sebagai promotor dalam K_2CO_3 dapat mempercepat proses absorpsi. Salah satu contoh penelitian terdahulu adalah dengan penambahan promotor MDEA (Metildiethanolamine) dan promotor DEA (Diethanolamine) pada larutan K_2CO_3 kemudian dikorelasikan dengan model E-NRTL. DEA memiliki kelemahan yaitu produk degradasinya bersifat korosif dan juga sering terjadi foaming pada konsentrasi DEA yang tinggi. Sedangkan kelemahan MDEA yaitu lebih selektif terhadap H_2S dan reaktivitas terhadap CO_2 rendah, dan agak sulit untuk absorpsi gas pada tekanan rendah.

Dari uraian di atas maka pada penelitian ini digunakan campuran MDEA-DEA sebagai promotor yang diharapkan bisa tahan degradasi produk, tahan korosi, fouling, dan foaming. Data kesetimbangan yang didapatkan dari eksperimen dikorelasikan dengan model elektrolit-NRTL. Karena itu perbandingan antara hasil eksperimen dan hasil estimasi dapat dilakukan. Selain itu bisa didapatkan juga data pengaruh larutan K_2CO_3 -MDEA-DEA terhadap solubilitas gas CO_2 .

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data solubilitas CO₂ dalam larutan K₂CO₃ dengan promotor campuran (MDEA-DEA) dalam beberapa konsentrasi *solvent*, konsentrasi gas CO₂ dan beberapa suhu pada tekanan atmosferik.

1.4 Manfaat Penelitian

Dari penelitian ini, data solubilitas CO₂ dalam larutan K₂CO₃ dengan penambahan promotor amine campuran MDEA-DEA dapat dijadikan sebagai acuan proses CO₂ *removal* yang diperlukan untuk desain, operasi, dan optimasi peralatan pengolahan gas asam pada dunia industri.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

CO₂ merupakan produk samping yang umumnya terdapat pada setiap pabrik, terutama pabrik gas alam dan pabrik ammonia. CO₂ biasanya terdapat pada aliran gas, tidak hanya terlarut pada gas sintesis tetapi juga menyebabkan masalah operasional serta juga sebagai racun pada sintesis katalis yang digunakan dalam pabrik. Beberapa metode yang umumnya digunakan untuk penyerapan CO₂ adalah sebagai berikut:

1. Absorpsi Kimia
2. Absorpsi Fisika
3. Pemisahan menggunakan membran
4. Adsorpsi
5. Pemisahan dengan sistem cryogenic (pada suhu rendah)

2.1 Metode Absorpsi

Absorpsi adalah suatu proses pemisahan komponen campuran gas dengan melarutkannya ke dalam *liquid* pelarut. Cairan yang digunakan umumnya tidak mudah menguap dan larut dalam gas. Metode absorpsi terbagi atas 2 jenis, yaitu absorpsi kimia dan absorpsi fisik.

2.1.1 Absorpsi Kimia

Absorpsi Kimia merupakan sistem yang paling umum digunakan saat sekarang untuk penyerapan CO₂. Sistem Absorpsi Kimia telah digunakan sejak tahun 1930 untuk menyerap CO₂ pada produksi ammonia serta pemurnian gas alam.

Pada umumnya, CO₂ dipisahkan dengan cara mengalirkan gas melalui sistem yang berlangsung secara terus-menerus. Sistem tersebut terdiri atas absorber dan desorber. Proses absorpsi tersebut menggunakan alkaline sebagai pelarutnya, biasanya adalah amine. Pada desorber, CO₂ yang telah terserap dialirkan ke stripper untuk

diregenerasi kemudian dikirim kembali ke absorber. Panas yang dihasilkan dari reboiler digunakan untuk memanaskan pelarut sesuai dengan suhu yang dibutuhkan, untuk mengalirkan panas pada proses desorpsi, serta memproduksi steam untuk proses regenerasi pelarut pada stripper. (Devries, 2014)

Untuk absorpsi kimia transfer massanya dilakukan dengan bantuan reaksi kimia. Suatu pelarut kimia yang berfungsi sebagai absorben akan bereaksi dengan gas asam (CO_2) menjadi senyawa lain, sehingga campuran gas tidak lagi mengandung gas CO_2 .

2.1.2 Absorpsi Fisika

Prinsip dari proses absorpsi fisika adalah dengan menggunakan absorben yang dapat melarutkan acid gas dari aliran gas, sementara gas hidrokarbon itu sendiri tidak dapat larut di dalamnya, sehingga diharapkan produk yang dihasilkan merupakan gas hidrokarbon murni.

Dalam kasus di mana ada aliran tekanan tinggi dengan mengandung CO_2 , lebih menguntungkan untuk menggunakan pelarut fisik dibandingkan pelarut kimia. Daya serap dari pelarut ini meningkat dengan tekanan gas eksternal dan menurun dengan suhu. Oleh karena itu, CO_2 dapat dipisahkan dari pelarut dengan mengurangi tekanan di desorber, yang secara signifikan dapat mengurangi kebutuhan energi dalam proses desorpsi.

Berbeda dengan absorpsi kimia, proses pelarutan yang terjadi adalah proses pelarutan biasa tanpa mengikutsertakan reaksi kimia. Keuntungan dari proses fisika ini adalah panas yang dibutuhkan untuk regenerasi relatif kecil dibandingkan proses kimia, karena regenerasi larutan tidak perlu dilakukan dengan penambahan temperatur, cukup dengan menurunkan tekanan sebagai driving force-nya. Keuntungan lainnya adalah semua solvent fisika relatif stabil dan tahan terdegradasi, sehingga tidak menimbulkan korosi. Kerugiannya adalah jumlah solvent yang digunakan relatif banyak dan juga proses fisika ini cenderung lebih selektif terhadap H_2S dibandingkan dengan CO_2 . Pelarut fisik yang biasa digunakan adalah metanol dingin (*Rectisol process*),

dimetileter polietilen glikol (*Selexol process*), propilena karbonat (*Fluor process*) dan sulpholane.

2.2 Kestimbangan Fase

Karakteristik dari kestimbangan fase pada dalam termodinamika adalah adanya kesamaan suhu, tekanan, dan fugasitas dari masing-masing komponen dalam semua fasa berada dalam kestimbangan dan energi bebas Gibbs total mencapai minimum.

Pada umumnya, potensial kimia suatu komponen ditransformasikan sebagai fugasitas komponen tersebut, yaitu :

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.1)$$

Aturan *Lewis/Randal* mendefinisikan fugasitas untuk larutan ideal adalah fungsi dari konsentrasi :

$$\hat{f}_i^{ideal} = x_i f_i \quad (2.2)$$

Dimana x_i adalah fraksi mol dari spesies i . Apabila larutan tidak ideal, maka faktor koreksi digunakan untuk menyatakan koefisien aktifitas γ .

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{ideal}} = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} \quad (2.3)$$

Kestimbangan uap-cair direpresentasikan dalam fugasitas sebagai fungsi dari konsentrasi dan tekanan. Untuk spesies i dalam campuran uap:

$$\hat{f}_i^V = y_i \hat{\phi}_i P \quad (2.4)$$

Untuk spesies i dalam larutan cair:

$$\hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i \quad (2.5)$$

Pada kondisi kestimbangan maka berlaku (formulasi gamma phi VLE):

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i f_i \quad (2.6)$$

Persamaan fugasitas spesies i murni adalah:

$$f_i = \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.7)$$

Faktor eksponensial tersebut dikenal sebagai faktor poynting. Substitusi persamaan (2.7) ke (2.6) maka didapat:

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.8)$$

atau

$$y_i \Phi_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.9)$$

dimana:

$$\Phi_i = \frac{\hat{\phi}_i}{\phi_i^s} \exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.10)$$

Pada tekanan rendah, persamaan VLE yang lebih realistis hanya menganggap fasa uap sebagai model gas ideal dimana:

$$\hat{\phi}_i = \hat{\phi}_i^s = 1 \quad \text{dan} \quad P = P_i^s \cong 0 \quad \text{atau faktor}$$

$$\exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) = 1$$

Sehingga harga $\Phi_i = 1$, atau persamaan (2.9) menjadi :

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.11)$$

Kondisi kesetimbangan dinyatakan dengan energi Gibbs (G) yang dimiliki sistem tersebut, perubahan energi Gibbs yang terjadi untuk semua proses irreversibel dinyatakan :

$$dG^{Tot} \leq 0 \quad (2.12)$$

Pertidaksamaan ini menyatakan bahwa dalam sistem tertutup pada tekanan dan temperatur tetap, apabila perubahan

properti terjadi maka energi Gibbs total akan menurun. Dengan kata lain energi Gibbs akan minimal pada kondisi kesetimbangan.

Energi Gibbs total memberikan kondisi umum suatu kesetimbangan. Untuk larutan, digunakan term energi Gibbs eksek yang mempresentasikan penyimpangan dari larutan ideal, secara matematis dapat dinyatakan :

$$G_i^{ex} = G_i - G_i^{ideal} \quad (2.13)$$

Dimana G_i merupakan energi Gibbs molar untuk spesies i :

$$G_i = \Gamma(T) + RT \ln \hat{f}_i \quad (2.14)$$

$\Gamma(T)$ adalah konstanta integrasi.

Substitusi Persamaan (2.14) ke Persamaan (2.13) dan menggabungkan dengan aturan *Lewis/Randal* maka diperoleh :

$$G_i^{ex} = RT \ln \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} = RT \ln \gamma_i \quad (2.15)$$

2.3 Hukum Henry

Untuk sistem $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-DEA-MDEA}$ dengan CO_2 sebagai *solute*, digunakan pendekatan hukum *Henry* untuk perhitungan koefisien aktifitas CO_2 yaitu :

$$P_{\text{CO}_2} = H_{\text{CO}_2} \gamma_{\text{CO}_2}^* x_{\text{CO}_2} \quad (2.16)$$

Sebagai *reference state* digunakan pengenceran tak berhingga dalam air sehingga $\gamma_{\text{CO}_2}^* \rightarrow 1$, dan konstanta *Henry* untuk air murni adalah :

$$H_{\text{CO}_2}^w = \frac{P_{\text{CO}_2}}{x_{\text{CO}_2}} \quad (2.17)$$

Koefisien aktifitas dalam campuran *solvent* dinyatakan :

$$\gamma_{\text{CO}_2}^* = \frac{H_{\text{CO}_2}}{H_{\text{CO}_2}^w} \quad (2.18)$$

Konstanta *Henry* CO₂ dalam campuran *solvent* dicari dari data kelarutan CO₂ (eksperimen), sedangkan konstanta *Henry* CO₂ dalam air murni ditentukan dari persamaan korelasi sebagai berikut (*Austgen dkk, 1991*) :

$$\ln H_{CO_2}^w = 170,7126 - 8477,711/T - 21,95743 \ln T + 0,005781T \quad (2.19)$$

konstanta *Henry* dalam satuan Pa, T adalah temperatur sistem dalam Kelvin.

2.4 Kestimbangan Reaksi Kimia

Permasalahan dalam menentukan komposisi kesetimbangan pada sistem reaktif membutuhkan kondisi dan informasi spesifik mengenai komponen yang terdapat pada sistem tertutup. Konstanta kesetimbangan untuk tiap-tiap reaksi dalam sistem tertutup diberikan oleh Smith *et al.* (2001) sebagai berikut :

$$K = \prod_i (x_i \gamma_i)^{v_i} = \exp\left(\frac{-\Delta G^o}{RT}\right) \quad (2.20)$$

Sedangkan hubungan ΔG^o dan ΔH^o adalah :

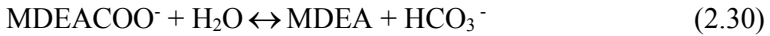
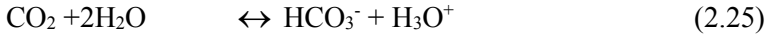
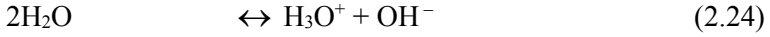
$$\Delta H^o = -RT^2 \frac{d(\Delta G^o / RT)}{dT} \quad (2.21)$$

ΔH^o merupakan perubahan *enthalpy* reaksi standart.

Kombinasi Persamaan (2.20) dan Persamaan (2.21) :

$$\int d(\ln K) = \int \frac{\Delta H^o}{RT^2} dT \quad (2.22)$$

Pada sistem larutan CO₂-K₂CO₃-MDEA-DEA kesetimbangan reaksi kimia yang terjadi adalah :



Pada larutan Potassium Karbonat tidak pekat, gas CO₂ bereaksi dengan prinsip mekanisme reaksi asam basa berpenyangga dengan senyawa alkanolamine dimana reaksi kesetimbangannya dapat dituliskan sebagai reaksi disosiasi kimia.

Untuk molekular solute, CO₂, kesetimbangan fisika diekspresikan oleh :

$$y_m \phi_m P = x_m \gamma_m^* H_{m,w}^{(P_w^S)} \exp \frac{\bar{v}_{m,w}^\infty (P - P_w^S)}{RT} \quad (2.31)$$

Di mana $H_{m,w}^{(P_w^S)}$ adalah konstanta *Henry solute* dalam air pada temperatur sistem, ϕ_m koefisien fugasitas, P tekanan sistem, P_w^S tekanan uap pada air murni pada temperatur sistem T, dan $\bar{v}_{m,w}^\infty$ adalah parsial molar volume untuk molekular *solute* m pada pelarutan tak berhingga dalam air.

Untuk air, VLE diekspresikan oleh :

$$y_{H_2O} \phi_{H_2O} P = x_{H_2O} \gamma_{H_2O} \phi_w^S P_w^S \exp \frac{v_w^l (P - P_w^S)}{RT} \quad (2.32)$$

Dimana φ_w^s adalah koefisien fugasitas untuk air jenuh pada temperatur sistem dan v_w^l molar volume untuk air murni pada temperatur sistem.

Molar volume air murni dapat dicari dengan cara massa molekul relatif dari air murni dibagi dengan densitasnya, sedangkan tekanan uap *saturated* dari air murni diperoleh dari persamaan *Antoine*.

2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)

Electrolyte-nonrandom two-liquid (e-NRTL) merupakan pengembangan dari model NRTL untuk sistem elektrolit. Model ini pertama kali diusulkan oleh Chen *et al.*, (1982) serta Chen dan Evans (1986) kemudian dikembangkan oleh Mock dan Chen (1986). Perbedaan model ini dengan NRTL adalah terdapat penambahan fraksi mol kation (x_c) dan anion (x_a) dengan asumsi disosiasi total pada komponen elektrolit.

Model E-NRTL memprediksi kelakuan larutan elektrolit dan dapat diaplikasikan secara luas dalam industri untuk simulasi proses perlakuan gas. Secara umum energi Gibbs eksis pada model E-NRTL merupakan gabungan dari dua faktor yaitu *long range* (LR) dan *short range* (SR). Ketika larutan encer yang dimana molekul-molekul zat terlarut saling berjauhan satu sama lain, maka energi Gibbs eksis didominasi oleh interaksi *long-range* (LR). Sedangkan dalam larutan yang pekat dimana jarak molekul zat terlarut saling berdekatan dan berinteraksi satu sama lain maka energi Gibbs eksis didominasi oleh interaksi *short-range* (SR).

Austgen *et al.* (1989) mengembangkan model elektrolit NRTL dimana terdapat tiga kontribusi. Pertama, Long Range force yang terdiri atas dua kontribusi yaitu model PDH (Pitzer-Debye-Huckel) yang menghitung adanya kontribusi elektrostatis antar semua ion. Kontribusi kedua yaitu kontribusi ion-reference-state-transfer yang dinyatakan dengan persamaan Born. Ketiga adalah kontribusi *short range* yang dinyatakan dengan persamaan local composition elektrolit NRTL yang menghitung adanya interaksi

short range semua spesies. Pendekatan yang digunakan adalah dengan mengasumsikan bahwa energi Gibbs dari sistem elektrolit dapat dianggap sebagai penjumlahan 2 bentuk, pertama dihubungkan pada *long range forces* antara ion-ion dan lainnya pada *short range forces* antara semua spesies.

Total kontribusi terhadap energi Gibbs ekskes adalah:

$$\frac{g_i^{ex*}}{RT} = \frac{g_{LR,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{SR,i}^{ex*}}{RT} = \left(\frac{g_{PDH,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{Born,i}^{ex*}}{RT} \right) + \frac{g_{lc,i}^{ex*}}{RT} \quad (2.33)$$

Atau

$$\ln \gamma_i = (\ln \gamma_{PDH,i} + \ln \gamma_{Born,i}) + \ln \gamma_{lc,i} \quad (2.34)$$

2.5.1 Long Range Forces

Rumus Ptzr-Debye-Huckel digunakan untuk menunjukkan kontribusi interaksi ion-ion *long range*, yang mana sangat penting pada konsentrasi yang rendah. Model Pitzer-Debye-Huckel merupakan ekspresi untuk energi Gibbs ekskes, dimana nilai fraksi mol adalah satu untuk pelarut dan nol untuk ion-ion. Model Pitzer-Debye-Huckel ini merepresentasikan energi Gibbs ekskes sebagai:

$$g_{PDH}^{ex*} = -RT \left(\sum_k x_k \right) \left(\frac{1000}{MW} \right)^{0.5} \left(\frac{4A_\phi I_x}{\rho} \right) \ln(1 + \rho I_x^{0.5}) \quad (2.35)$$

dimana:

x = fraksi mol

MW = berat molekul dari pelarut

ρ = parameter pendekatan model PDH yang terdekat

I_x = Daya ionik yang dinyatakan dalam fraksi mol dan muatan z

$$I_x = \frac{1}{2} \sum_i x_i z_i^2 \quad (2.36)$$

Tanda (*) merujuk pada nergi Gibbs ekskes tak simetris.

Parameter Debye-Huckel, A_ϕ didapat dari :

$$A_{\phi} = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi N_0 \rho_s}{1000} \right)^{0.5} \left(\frac{e^2}{D_s kT} \right)^{1.5} \quad (2.37)$$

dimana:

- No = bilangan Avogadro (6.02×10^{23})
 ρ_s = densitas pelarut
 e = muatan elektron (1.6×10^{-19} Coulomb)
 D_s = konstanta dielektrik pelarut
 k = konstanta Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K)

Konstanta dielektrik dri pelarut dihitung sebagai :

$$D_s = \sum_i x_i D_i \quad (2.38)$$

dimana:

- x_i = fraksi massa spesies i
 D_i = konstanta dielektrik spesies i

2.5.2 Persamaan Born

Untuk menghitung energi Gibbs eksek pada saat perpindahan dari pengenceran yang tak terhingga di dalam pelarut campuran ke pengenceran yang tak terhingga di fasa encer, maka digunakan Persamaan Born (Robinson dan Stokes, 1970) memperkenalkan sistem long-range interaksi. Bentuk persamaannya adalah :

$$g_{Born}^{ex} = RT \left(\frac{e^2}{2kT} \right) \left(\sum_i \frac{x_i z_i^2}{r_i} \right) \left(\frac{1}{D_m} - \frac{1}{D_w} \right)^{1/2} \times 10^{-2} \quad (2.39)$$

Dimana D_m dan D_w masing-masing adalah konstanta dielektrik campuran pelarut dan air. Koreksi ini menentukan perbedaan energi Gibbs diantara ion-ion dalam campuran pelarut dan dalam air.

2.5.3 NRTL Term Sebagai Kontribusi Local Composition

Saat larutan menjadi lebih pekat, term yang mendeskripsikan interaksi di antara spesies netral dan spesies ionik dan spesies netral dan spesies netral menjadi penting. Interaksi tersebut digambarkan secara lokal, yaitu *short-range forces*. Wilson (1964) menurunkan persamaan untuk energi pencampuran non-elektrolit. Dasar penurunan adalah distribusi molekul i dan j , di sekitar pusat molekul i , diberikan oleh :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_k \exp\left(-\frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.40)$$

Renon dan Praunitz (1968) merumuskan ulang persamaan di atas dalam model NRTL, hingga pada modifikasi distribusi molekuler untuk menghitung pencampuran non-random :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_i \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.41)$$

α adalah parameter variabel. Nilainya berkisar antara 0,1 hingga 0,4 tergantung dari molekul dan molekul dan pelarut dalam sistem (Cullinane, 2004). Penambahan parameter non-random α , memperluas aplikasi model NRTL.

Baik antara model Wilson dan NRTL, keduanya menggunakan persamaan energi Gibbs bebas pencampuran dalam bentuk :

$$\frac{g^M}{RT} = \sum_i x_i \ln \xi_i \quad (2.42)$$

Dimana ξ adalah fraksi volume i sekitar pusat molekul. Fraksi volume diturunkan dari distribusi molekuler yang diberikan di atas dan dapat ditulis :

$$\xi_i = \frac{x_i V_i \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)}{\sum_j x_j V_j \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)} \quad (2.43)$$

Dimana V menunjukkan volume molar. Energi dari pencampuran dihubungkan dengan energi Gibbs eksres melalui persamaan:

$$\frac{g^{ex}}{RT} = \frac{g^M}{RT} - \sum_i x_i \ln x_i \quad (2.44)$$

Chen *et al.* (1986) mengembangkan persamaan ini untuk larutan multi-komponen dari spesies netral maupun ionik. Pengembangan model ini oleh Chen, menggabungkan tiga sel atau grup yang berbeda dari interaksi ion dan molekul, dengan membuat 2 asumsi untuk gambaran fisik dari interaksi spesies:

1. Dua sel termasuk pusat kation, c atau pusat anion, a, dan diasumsikan mengalami saling tolakutnuk ion sejenis. Ini berarti pusat ion dikelilingi oleh molekul dan ion yang berbeda muatan.
2. Satu sel terdiri dari sebuah pusat molekul lokal, m, dengan muatan netral, yaitu muatan sekitar pusat molekul sama dengan nol.

Interaksi antar sel dapat didefinisikan sebagai interaksi dua spesies. Energi Gibbs dapat dmodelkan sebagai fungsi dari interaksi model berikut :

$$\tau_{ji,ki} = \frac{G_{ji} - G_{ki}}{RT} \quad (2.45)$$

Dalam sistem elektrolit, semua komponen dapat dikategorikan dalam tiga tipe :

- a. Spesies molekul (m) : solute dan solvent
- b. Spesies cationic (c) : kation
- c. Spesies anionic (a) : anion

Sebuah model global dapat disusun sebagai jumlah ineteraksi spesifik spesies pada komposisi rerata larutan. Sehingga energi Gibbs eksres dari *local interaction* dapat diprediksi dari model NRTL sebagai berikut :

$$\frac{G_{lc}^{ex}}{RT} = \sum_m \left(X_m \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c X_c \left(\sum_{a'} \left(\frac{X_{a'} \sum_j G_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}}{\sum_{a''} X_{a''} \sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) + \sum_a \left(\frac{X_{c'} \sum_j G_{ja,c'a} \tau_{ja,ca}}{\sum_{c''} X_{c''} \sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right) \right) \quad (2.46)$$

$$X_j = C_j x_j \quad ; \quad j = m, c, a \quad (2.47)$$

$$x_j = \frac{n_j}{\sum_j n_j} \quad (2.48)$$

$$G_{ja,c'a} = \exp(-\alpha_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}) \quad (2.49)$$

$$G_{jc,a'c} = \exp(-\alpha_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}) \quad (2.50)$$

$$G_{jm} = \exp(-\alpha_{im} \tau_{im}) \quad (2.51)$$

dimana :

$$X_j = x_j C_j ;$$

($C_j = Z_j$ untuk ion-ion dan sama dengan 1 untuk molekul)

α = parameter nonrandomness

T = parameter interaksi biner

Koefisien aktivitas untuk masing-masing komponen dapat dihitung sebagai berikut :

$$\begin{aligned}
\ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\
& + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\
& + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \quad (2.52)
\end{aligned}$$

Untuk spesies kation :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = & \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \sum_m \frac{X_m G_{cm}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\
& + \sum_a \sum_{c'} \frac{Y_{c'} X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'ac}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \quad (2.53)
\end{aligned}$$

Untuk spesies anion :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = & \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \sum_m \frac{X_m G_{am}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\
& + \sum_{c'} \sum_a \frac{Y_{a'} X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'cc}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{ka,a'c}}{\sum_k X_k G_{ka,a'c}} \right) \quad (2.54)
\end{aligned}$$

Dari persamaan (2.46)-(2.54) dibutuhkan parameter-parameter sebagai berikut :

Nonrandomness parameter

$$\alpha_{mm'} = \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} = \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter dihitung dari model binary parameter yang telah disesuaikan. Dan, dapat dihitung sebagai berikut :

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (2.55)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (2.56)$$

Jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a , dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , dapat dihitung sebagai berikut :

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_{a'} X_{a'}} \quad (2.57)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_{c'} X_{c'}} \quad (2.58)$$

Kemudian, G_{cm} dan G_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (2.59)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (2.60)$$

Kemudian, τ_{cm} dan τ_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$\tau_{cm} = -\frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (2.61)$$

$$\tau_{am} = -\frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (2.62)$$

Selanjutnya dapat dihitung parameter-parameter yang lain sebagai berikut :

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (2.63)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (2.64)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.65)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.66)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (2.67)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ac} \tau_{ma,ac}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ac}) \quad (2.68)$$

Kondisi acuan kontribusi NRTL dapat dikonversikan ke bentuk asimetri dengan koreksi terhadap koefisien aktivitas pelarutan tak berhingga.

$$g_{NRTL}^{ex} = \frac{g_{NRTL}^{ex}}{RT} + \left(\sum_{m \neq w} x_m \ln \gamma_m^\infty + \sum_c x_c \ln \gamma_c^\infty + \sum_a x_a \ln \gamma_a^\infty \right) \quad (2.69)$$

$$\ln \gamma_m^\infty = \tau_{wm} + G_{mw} \tau_{mw} \quad (2.70)$$

$$\ln \gamma_c^\infty = Z_c \left(G_{cw} \tau_{cw} + \frac{\sum_{a'} x_{a'} \tau_{wc,a'c}}{\sum_{a''} x_{a''}} \right) \quad (2.71)$$

$$\ln \gamma_a^\infty = Z_a \left(G_{aw} \tau_{aw} + \frac{\sum_{c'} x_{c'} \tau_{wa'a}}{\sum_{c''} x_{c''}} \right) \quad (2.72)$$

Subskrip w menunjukkan air.

2.6 Parameter Interaksi Pada Model E-NRTL

Terdapat 3 jenis parameter interaksi biner pada NRTL untuk energi Gibbs eksres yaitu, molekul-molekul, molekul-pasangan ion, pasangan ion-pasangan ion (anion-kation).

Parameter interaksi molekul-molekul τ dinyatakan dengan persamaan :

$$\tau = A + B/T(K) \quad (2.73)$$

Dimana parameter interaksi molekul-molekul menurut Posey dan Rochelle (1997) adalah sebagai berikut.

Tabel 2.1 Parameter Interaksi Molekul-Molekul

Parameter	A	B	α
H_2O -MDEA	9,473	-1902,4	0,2
MDEA- H_2O	-2,173	-147,4	0,2
H_2O -CO ₂	10,064	-3268,135	0,2
CO ₂ - H_2O	10,064	-3268,135	0,2
All other binaries	0	0	0,2

Parameter interaksi molekul-molekul pada tabel 2.1 merupakan *initial value* yang digunakan untuk menentukan nilai parameter interaksi molekul-molekul yang dibutuhkan dalam model e-NRTL ini.

Sedangkan parameter interaksi untuk molekul-pasangan ion dan parameter interaksi pasangan ion-molekul sesuai persamaan berikut :

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (2.74)$$

Dimana parameter interaksi molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul menurut Liu *et al.* (1999) adalah sebagai berikut.

Tabel 2.2 Parameter Interaksi Molekul-Pasangan Ion dan Pasangan Ion-Molekul

Parameter	A	B	α
<i>H₂O-pasangan ion</i>	-8	0	0,2
<i>pasangan ion-H₂O</i>	-4	0	0,2
<i>molekul-pasangan ion</i>	15	0	0,2
<i>pasangan ion-molekul</i>	-8	0	0,2
<i>CO₂-pasangan ion</i>	15	0	0,1
<i>pasangan ion-CO₂</i>	-8	0	0,1

Interaksi antar pasangan ion pada umumnya tidak signifikan dan tidak dimasukkan dalam model ini. Parameter interaksi molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul pada tabel 2.2 merupakan *initial value* yang digunakan untuk menentukan nilai parameter interaksi molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul yang dibutuhkan dalam model e-NRTL ini.

2.7 Metode GRG (Generalized Reduced Gradient) Non-linear

Pada tahun 1967, Wolfe mengembangkan metode *reduced gradient* berdasarkan teknik eliminasi variabel sederhana untuk permasalahan dengan batasan berupa persamaan (Arora, 2012). Metode Generalized Reduced Gradient merupakan perluasan metode reduced gradient untuk menangani permasalahan dengan batasan berupa pertidaksamaan nonlinear. Algoritma metode GRG untuk meminimalkan fungsi $f(x)$, $x=[x_1, x_2, \dots, x_n]$ dengan constrain $h_k(x)=0$, $k=1, 2, \dots, K$, adalah sebagai berikut:

1. Tentukan nilai awal x^0 dan search parameter α^0 , serta error ε dan reduction parameter γ , $0 < \gamma < 1$.
2. Bagi x menjadi \hat{x} (basic variable) dan \bar{x} (non-basic variable), dengan ketentuan jumlah non-basic variable merupakan selisih antara jumlah total variabel dengan jumlah persamaan constrain
3. Hitung nilai turunan $\nabla \bar{f}(x^{(t)})$ dan $\nabla \hat{f}(x^{(t)})$

4. Hitung nilai $C=[\nabla_1 \bar{h}_k; \nabla_2 \bar{h}_k; \dots; \nabla_K \bar{h}_k]$ dan $J=[\nabla_1 \hat{h}_k; \nabla_2 \hat{h}_k; \dots; \nabla_K \hat{h}_k]$
5. Hitung $\nabla \tilde{f}(x^{(t)}) = \nabla \bar{f}(x^{(t)}) - \nabla \hat{f}(x^{(t)}) J^{-1} C$
6. If $\|\nabla \tilde{f}(x^{(t)})\| \leq \varepsilon$, berhenti. Jika tidak, tetapkan $\bar{d} = -(\nabla \tilde{f})^T$, $\hat{d} = -J^{-1} C \bar{d}$, dan $d = (\hat{d}, \bar{d})^T$
7. Tetapkan search parameter $\alpha = \alpha^0$
8. Untuk $i=1,2,3,\dots$:
 - a. Hitung $v^{(i)} = x^{(t)} + \alpha d$. Jika $|h_k(v^{(i)})| \leq \varepsilon$, $k=1,2,\dots,K$. lanjut ke (d). Jika tidak, lanjutkan.
 - b. $\hat{v}^{(i+1)} = \hat{v}^{(i)} - J^{-1} v^{(i)} \cdot h(v^{(i)})$ dan $\bar{v}^{(i+1)} = \bar{v}^{(i)}$
 - c. Jika $\|\hat{v}^{(i+1)} - \hat{v}^{(i)}\| > \varepsilon$, kembali ke (b). Jika tidak, jika $h_k(v^{(i)}) \leq \varepsilon$, $k=1,2,\dots,K$, lanjut ke langkah (d), jika tidak, $\alpha = \alpha \gamma$ dan kembali ke langkah (a)
 - d. Jika $f(x^{(t)}) \leq f(v^{(i)})$, $\alpha = \alpha \gamma$ dan kembali ke langkah (a). Jika tidak, $x^{(t+1)} = v^{(i)}$ dan kembali ke tahap (2)

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Deskripsi Penelitian

Secara garis besar penelitian ini dilakukan untuk mendapatkan data solubilitas gas CO_2 dalam sistem K_2CO_3 -(MDEA+DEA)- H_2O pada tekanan atmosfer dan suhu 30°C , 40°C dan 50°C dalam berbagai konsentrasi pelarut (MDEA+DEA) dan berbagai konsentrasi gas CO_2 (5%, 10%, dan 20%).

Solubilitas CO_2 diperlukan untuk menganalisa data absorpsi eksperimen agar dapat menentukan kinetika reaksi dengan amine atau untuk digunakan dalam model prediksi rate absorpsi gas. Semua sifat ini tidak selalu dapat diukur secara langsung dengan metode eksperimen karena gas akan terjadi reaksi kimia dengan *solvent*nya.

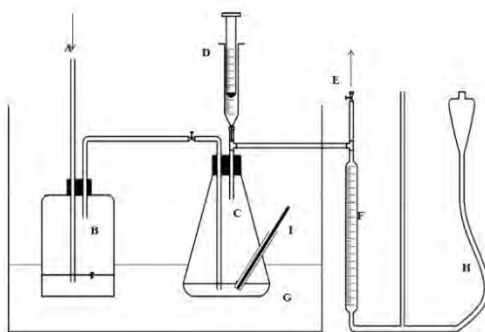
Kemiripan struktur molekul dan parameter interaksi molekular antara CO_2 dan N_2O (Clarke, 1964), mengasumsi bahwa ratio solubilitas CO_2 dan N_2O dalam air dan dalam larutan encer dari solven organik mendekati 5% pada temperatur sama. Hal ini berarti ratio $\text{H}_{\text{CO}_2}/\text{H}_{\text{N}_2\text{O}}$ dalam air dan larutan dengan konsentrasi amine yang berbeda dianggap konstan pada temperatur konstan.

Metode penelitian ini dilakukan dengan beberapa tahap. Tahap pertama adalah menggunakan gas N_2O untuk memperoleh nilai konstanta Henry CO_2 . Langkah kedua adalah menggunakan gas CO_2 (5%, 10%, dan 20%) untuk memperoleh tekanan parsial CO_2 untuk masing-masing konsentrasi. Kemudian langkah yang terakhir adalah mengkorelasikan hasil eksperimen dengan E-NRTL.

3.2 Peralatan Percobaan

Pada penelitian ini peralatan yang digunakan didasarkan pada eksperimen Haimour dan Sandall (1984) yang telah

dimodifikasi. Skema alat percobaan dapat dilihat pada Gambar 3.1. Prinsip kerja dari metode ini yaitu mengalirkan gas selama beberapa menit kemudian mengkontakan gas tersebut dengan liquid pada temperatur dan tekanan konstan. Kesetimbangan tercapai apabila tidak ada perubahan dalam volume gas. Perubahan volume gas yang terjadi menyatakan bahwa ada sejumlah gas yang terlarut dalam liquid.



Gambar 3.1 Skema Peralatan Penelitian

Keterangan :

- A. Aliran gas masuk
- B. Saturation Flask
- C. Absorption Flask
- D. Syringe
- E. Aliran gas keluar
- F. Buret
- G. Waterbath shaker
- H. Movable barometric leg
- I. Thermometer

Peralatan terdiri dari alat-alat utama, yaitu *saturation flask*, *absorption flask*, *syringe*, dan *movable barometric leg*. *Saturation flask* berfungsi untuk tempat menjenuhkan gas CO₂ terhadap uap air. Lalu *absorption flask* adalah tempat terjadinya penyerapan gas dalam larutan yang diinjeksikan menggunakan *syringe*. Sedangkan

movable barometric leg digunakan untuk menyamakan tekanan sistem dengan tekanan sekitar (atmosferik) dengan ditandai oleh level manometer air.

3.3 Bahan Percobaan

Bahan-bahan utama yang digunakan dalam percobaan :

1. Gas Carbon Dioxide (CO₂) (5, 10, 20% CO₂ dan N₂)
2. Gas Nitrogen Oxide (N₂O) ≥ 99 %
3. Potassium Karbonat (K₂CO₃)
4. Methyl Diethanolamine (MDEA) ≥ 99 % MERCK
5. Diethanolamine (DEA) ≥ 98 % Sigma-Aldrich
6. Hydrogen Chloride (HCl) 3 N
7. Metil Orange (MO)
8. Phenolphthaline (PP)
9. Aquabides

3.4 Variabel Percobaan

Variabel dalam percobaan ini adalah:

1. Temperatur : 30°C, 40°C, dan 50°C
2. Komposisi promotor (MDEA+DEA) : 0-5%
3. Komposisi gas CO₂ : 5%, 10%, dan 20% CO₂

3.5 Pelaksanaan Percobaan

3.5.1 Persiapan Percobaan

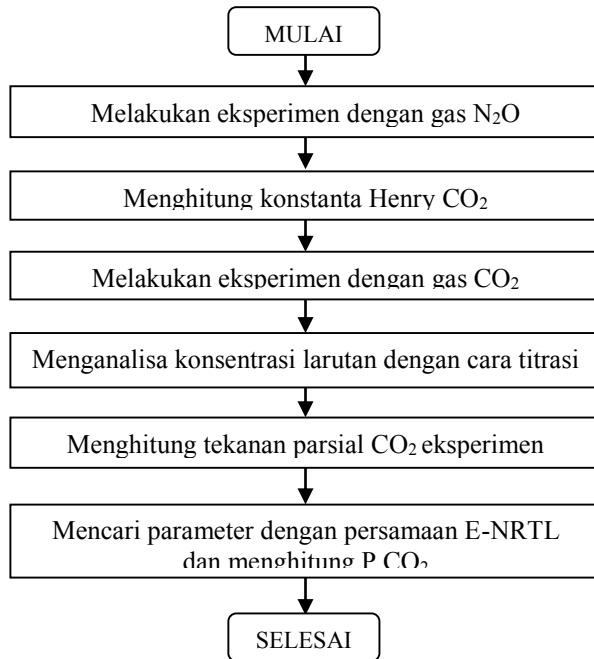
Mempersiapkan larutan amine dengan cara melarutkan K₂CO₃ 30% dengan promotor (MDEA+DEA) dengan berbagai konsentrasi 0-5%, lalu menambahkan 65% aquades dengan kemurnian >99%. Konsentrasi larutan diukur dengan metode titrasi. Pengukuran densitas larutan amine dan komponen-komponen murni dilakukan dengan menggunakan piknometer. Temperatur *waterbath* dikontrol dengan perbedaan ±0,05°C.

3.5.2 Prosedur Penelitian

1. Membuat sampel penelitian dengan campuran yang terdiri dari 30% K_2CO_3 , 0-5% (MDEA+DEA) dan 65% sisanya aquabides.
2. Mempersiapkan kondisi peralatan dengan cara mengalirkan campuran gas ke dalam rangkaian alat selama ± 5 menit.
3. Menutup kedua valve sehingga gas terperangkap di dalam peralatan dengan keadaan tertutup rapat.
4. Mengkondisikan *Movable barometric leg* untuk menghasilkan tingkat manometer air yang sama pada kedua kaki buret. Dengan melakukan hal ini, tekanan di dalam peralatan dibuat sama dengan tekanan atmosfer di sekitarnya, yang diukur oleh manometer air.
5. Menginjeksi larutan sebanyak 20 mL menggunakan *syringe* ke dalam *Absorption Flask*.
6. Mengaduk sampel dengan *waterbath shaker*.
7. Mencatat volume gas setiap 4-5 menit hingga tercapai kesetimbangan. Kesetimbangan tercapai ketika level pada manometer air stabil (tidak terjadi perubahan lagi).
8. Melakukan analisa terhadap sampel dengan cara titrasi HCl.
9. Melakukan langkah yang sama untuk nilai variabel penelitian yang lain.
10. Melakukan korelasi dengan metode e-NRTL.

3.5.3 Diagram Alir Metodologi Penelitian

Gambar 3.2 merupakan diagram alir metodologi penelitian ini. Setelah melakukan penelitian, hasil eksperimen kemudian dihitung untuk mendapatkan tekanan parsial CO_2 . Kemudian hasil eksperimen dikorelasikan dengan model ENRTL. Gambar 3.3. menjelaskan prosedur untuk memperoleh parameter.



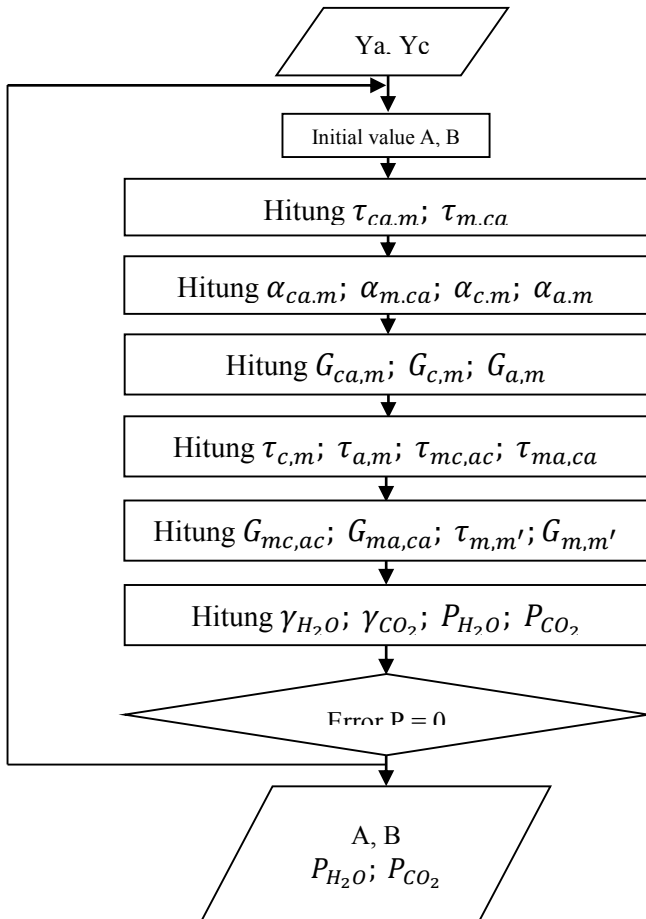
Gambar 3.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian

Setelah eksperimen dengan gas CO₂ selesai, sampel larutan diambil sebanyak 5 ml untuk dititrasi. Dari hasil titrasi menggunakan HCl 3N dengan indikator PP dan MO, didapatkan volume HCl yang dibutuhkan sampai larutan berubah warna. Kemudian dapat dihitung komposisi larutan sehingga didapatkan fraksi CO₃²⁻ dan HCO₃⁻. Dengan menggunakan persamaan kesetimbangan reaksi dari jurnal Austgen dan Rocelle, 1991, didapatkan jumlah mol CO₂ terlarut dan menggunakan stokiometri didapatkan jumlah mol CO₂ bereaksi, sehingga apabila dijumlahkan akan didapatkan jumlah mol CO₂ terabsorp.

Setelah itu bisa didapatkan nilai CO₂ loading dan tekanan parsial CO₂ untuk tiap-tiap konsentrasi gas umpan CO₂ dan tiap variabel promotor MDEA-DEA. Kemudian dapat dikorelasikan

dengan model e-NRTL dan dibuat grafik antara tekanan parsial CO_2 dengan CO_2 loading eksperimen dan korelasi.

Berikut ini adalah diagram alir untuk korelasi menggunakan model e-NRTL.



Gambar 3.3 Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E-NRTL

3.6 Evaluasi Data

Setelah melukan percobaan, kemudian hasil percobaan dihitung dengan menggunakan perhitungan-perhitungan berikut :

- Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N₂O (C_{A*})

$$V_{\text{gas terabsorb}} = V_{\text{sampel}} - \Delta V_{\text{gas}} \quad (3.1)$$

$$mol_{\text{total gas terabsorp}}(n) = \frac{PV}{RT} \quad (3.2)$$

$$C_{A^*} = \frac{mol_{\text{total gas terabsorp}}}{Volume_{\text{liquid}}} \quad (3.3)$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam larutan K₂CO₃

$$H_A = \frac{P_A}{C_A^*} \quad (3.4)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam larutan air

$$H_{CO_2, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \quad (3.5)$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam larutan air

$$H_{N_2O, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right) \quad (3.6)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam larutan K₂CO₃

$$\frac{H_{CO_2, a \text{ min } e}}{H_{N_2O, a \text{ min } e}} = \frac{H_{CO_2, \text{water}}}{H_{N_2O, \text{waer}}} \quad (3.7)$$

- Menghitung parameter

Parameter nonrandom

$$\begin{aligned} \alpha_{mm'} &= \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} \\ &= \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca} \end{aligned}$$

Parameter interaksi biner

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \\ \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_{a'} X_{a'}} \quad (3.8)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_{c'} X_{c'}} \quad (3.9)$$

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (3.10)$$

Dengan nilai konstanta A dan B didapatkan dari hasil fitting parameter.

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (3.11)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (3.12)$$

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (3.13)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (3.14)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (3.15)$$

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (3.16)$$

$$\tau_{cm} = - \frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (3.17)$$

$$\tau_{am} = - \frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (3.18)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.19)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.20)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (3.21)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ac} \tau_{ma,ac}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ac}) \quad (3.22)$$

- Menghitung nilai estimasi koefisien aktifitas (Υ) masing-masing komponen

$$\begin{aligned} \ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\ & + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\ & + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \quad (3.23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = & \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \sum_m \frac{X_m G_{cm}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\
& + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \quad (3.25)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = & \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \sum_m \frac{X_m G_{am}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\
& + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \quad (3.26)
\end{aligned}$$

- Membuat kurva solubilitas untuk berbagai konsentrasi amine (0-5%), dimana pada kurva tersebut juga terdapat variabel suhu dan konsentrasi gas CO₂, kemudian membandingkan hasil eksperimen dan hasil korelasi yang telah dilakukan.

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini memiliki tujuan untuk mendapatkan data solubilitas CO_2 dalam larutan K_2CO_3 -MDEA-DEA dalam konsentrasi antara 0-5% dengan suhu 30°C , 40°C , dan 50°C pada tekanan atmosferik. Data yang didapatkan akan dikorelasikan dengan menggunakan metode E-NRTL sehingga bisa memprediksi kondisi di luar data penelitian.

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui juga pengaruh dari penambahan campuran promotor MDEA-DEA terhadap solubilitas karbondioksida (CO_2) dalam larutan 30% massa *Potassium Carbonate* (K_2CO_3) dengan beberapa variabel penambahan antara 0-5% massa campuran MDEA-DEA.

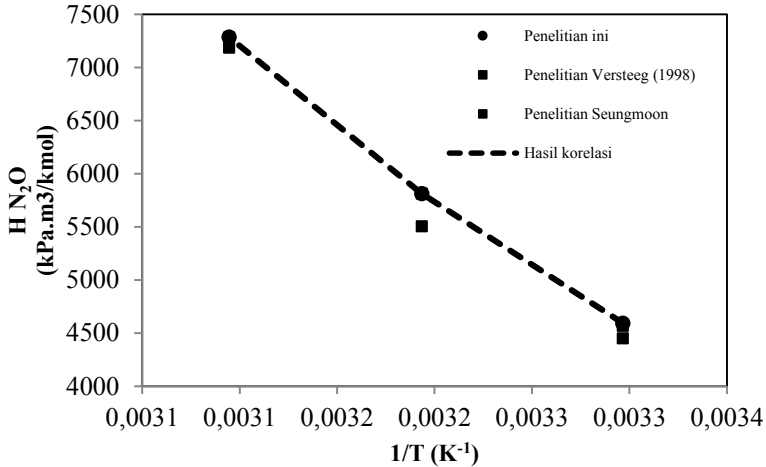
4.1 Hasil Validasi Peralatan Penelitian

Peralatan pada penelitian ini mengacu pada peralatan dari peneliti sebelumnya yang telah dimodifikasi sedemikian rupa. Sebelum peralatan digunakan pada penelitian ini, dilakukan validasi terlebih dahulu untuk mengetahui peralatan yang digunakan memadai atau tidak. Validasi dilakukan dengan menggunakan H_2O sebagai pelarut. Acuan yang digunakan pada validasi ini adalah hasil eksperimen penelitian yang telah dilakukan oleh Versteeg (1988) dan Seungmoon (2006) serta korelasi dari persamaan 3.6. Hasil validasi peralatan penelitian dapat dilihat pada Tabel 4.1 berikut ini:

Tabel 4.1 Hasil Validasi Peralatan Penelitian

T(K)	H_2O (kpa.m ³ /kmol) (Penelitian ini)	H_2O (kpa.m ³ /kmol) (Korelasi pers.3.6)	H_2O (kpa.m ³ /kmol) (Versteeg, 1988)	H_2O (kpa.m ³ /kmol) (Seungmoon, 2006)
303.35	4352,539	4592.525	4568	4450,2
313.15	5889,979	5812.771	5811	5504,92
323.15	7261,105	7284.592	7282	7184,94

Dari Tabel 4.1 tersebut, dapat dilihat bahwa nilai konstanta Henry yang didapatkan dari hasil validasi percobaan ini telah mendekati nilai hasil eksperimen yang telah dilakukan Versteeg (1988) dan Seungmoon (2006). Hal ini menunjukkan bahwa peralatan penelitian telah memadai untuk digunakan dalam melakukan penelitian pengaruh penambahan MDEA dan DEA terhadap solubilitas CO_2 dalam larutan potassium karbonat (K_2CO_3).



Gambar 4.1 Hasil Validasi Peralatan Eksperimen

4.2 Hasil Eksperimen dan Pembahasan

a. Solubilitas CO_2 secara Fisik

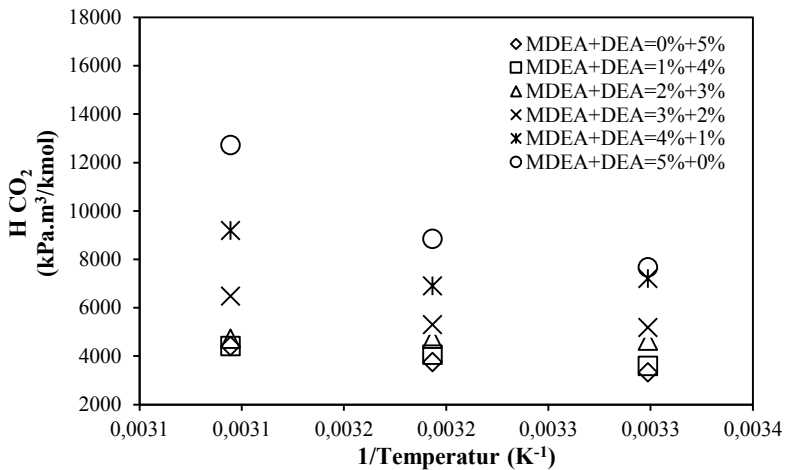
Solubilitas gas CO_2 dalam pelarut alkanolamine tidak dapat diukur secara langsung. Oleh karena itu, analogi gas N_2O digunakan untuk mengestimasi dan memprediksi solubilitas gas CO_2 dalam pelarut alkanolamine. Dalam penelitian ini, dilakukan dengan variabel komposisi larutan 30% massa K_2CO_3 dan 0-5% massa MDEA+DEA pada suhu 30, 40, dan 50°C.

Data solubilitas fisik CO_2 ini diperoleh dari persamaan analogi N_2O yang kemudian dikorelasikan menjadi persamaan

empiris untuk berbagai konsentrasi MDEA dan DEA sebagai berikut :

$$H = A \exp \frac{B}{T(K)} \quad (4.1)$$

Dari hasil percobaan yang telah dilakukan, didapatkan konstanta Henry N_2O yang kemudian dapat digunakan untuk mendapatkan nilai konstanta Henry CO_2 dengan cara analogi N_2O melalui persamaan (3.7). Setelah didapatkan nilai konstanta Henry CO_2 , dapat dibuat grafik antara konstanta Henry CO_2 dan $1/suhu$ yang ditunjukkan pada gambar 4.1.



Gambar 4.2 Konstanta Henry CO_2 pada 30% K_2CO_3 dan 0-5% MDEA-DEA

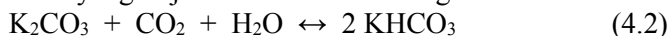
Dari gambar 4.2 tersebut menunjukkan hubungan antara konstanta Henry CO_2 dan $1/suhu$ pada 30% K_2CO_3 dan 0-5% MDEA-DEA. Grafik tersebut menunjukkan hubungan yang berbanding terbalik, semakin tinggi nilai $1/suhu$ maka semakin rendah nilai konstanta Henry. Hal ini menunjukkan kenaikan $1/suhu$ menyebabkan nilai konstanta Henry semakin rendah. Nilai

konstanta Henry yang rendah menunjukkan kelarutan gas dalam liquid yang semakin bagus, artinya kelarutan yang baik dengan jumlah gas yang terlarut lebih banyak terjadi pada suhu rendah daripada suhu tinggi. Selain itu dapat terlihat pula dengan jumlah promotor MDEA yang lebih banyak menyebabkan nilai konstanta Henry lebih tinggi. Hal tersebut berarti semakin banyak penambahan MDEA menyebabkan kelarutan gas semakin rendah.

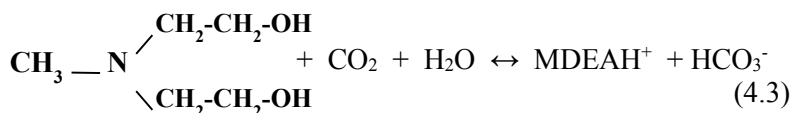
b. Solubilitas CO₂ secara Kimia

Pengaruh penambahan promotor MDEA-DEA terhadap solubilitas CO₂ dalam larutan potasium karbonat dapat dilihat dari percobaan penelitian ini. Setelah terjadi keadaan setimbang, sampel larutan diambil untuk dilakukan pengukuran densitas larutan menggunakan piknometer dan analisa larutan dengan cara titrasi menggunakan mikroburet untuk mendapatkan ketelitian yang lebih tinggi. Titrasi dilakukan dengan menggunakan dua indikator, yaitu PP dan MO. Indikator PP digunakan untuk menghitung kadar CO₃²⁻ dan indikator MO untuk menghitung kadar HCO₃⁻ dalam larutan. Analisa kadar HCO₃⁻ dalam larutan dilakukan untuk mengetahui jumlah gas CO₂ yang bereaksi dengan K₂CO₃ karena CO₂ yang terabsorpsi ada yang bereaksi dan ada pula yang terlarut dalam larutan K₂CO₃.

Reaksi yang terjadi dalam kesetimbangan larutan:



Di dalam larutan, aditif MDEA akan meningkatkan jumlah terbentuknya HCO₃⁻



Sehingga akan meningkatkan jumlah CO₂ bereaksi.



Gas CO₂ yang menjadi umpan akan kontak dengan larutan *benfield* yaitu potasium karbonat dengan promotor MDEA-DEA di dalam tabung absorpsi. CO₂ akan bereaksi dan ada juga yang tidak bereaksi sehingga CO₂ yang tidak bereaksi tersebut akan terlarut dalam larutan. Jumlah total CO₂ yang bereaksi dan yang terlarut adalah jumlah CO₂ terabsorp.

Perhitungan jumlah CO₂ bereaksi dapat dihitung dengan rumus stokiometri biasa. Sedangkan jumlah CO₂ terlarut dapat dihitung dengan menggunakan rumus konstanta kesetimbangan yang diambil dari *Austgen and Rocelle* (1991). Kemudian CO₂ bereaksi dan CO₂ bereaksi dijumlahkan sehingga didapatkan CO₂ terabsorp. Hasil perhitungan jumlah CO₂ terabsorp dalam larutan dapat dilihat pada tabel berikut:

Tabel 4.2 Hasil Perhitungan CO₂ Terabsorp pada suhu 30°C

MDEA (%)	DEA (%)	CO ₂ Terabsorp (mol)		
		CO ₂ 5%	CO ₂ 10%	CO ₂ 20%
0	5	0,023403481	0,02520434	0,030126695
1	4	0,023283487	0,025204359	0,030006728
2	3	0,022203283	0,025084359	0,029886691
3	2	0,022323328	0,025324481	0,02976678
4	1	0,022923522	0,025444537	0,029646721
5	0	0,022683469	0,025444558	0,029526644

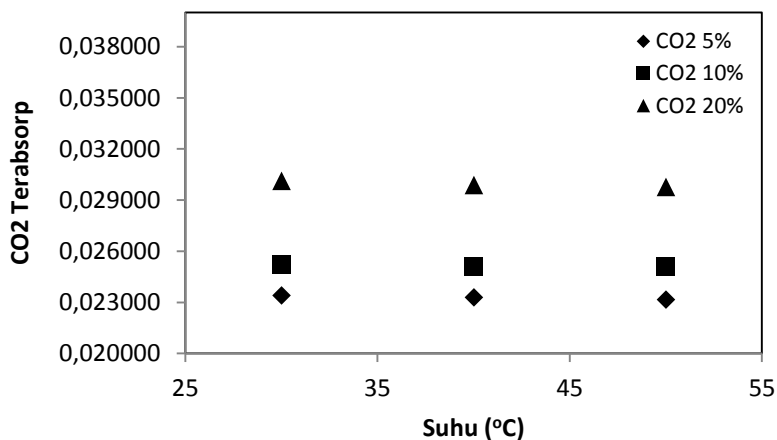
Tabel 4.3 Hasil Perhitungan CO₂ Terabsorp pada suhu 40°C

MDEA (%)	DEA (%)	CO ₂ Terabsorp (mol)		
		CO ₂ 5%	CO ₂ 10%	CO ₂ 20%
0	5	0,023283565	0,02508443	0,029886766
1	4	0,023163577	0,025084478	0,029406729
2	3	0,022323424	0,024964532	0,029526732
3	2	0,022683566	0,025324613	0,029286763
4	1	0,022563668	0,025324596	0,029166709
5	0	0,022683603	0,025084359	0,02905336

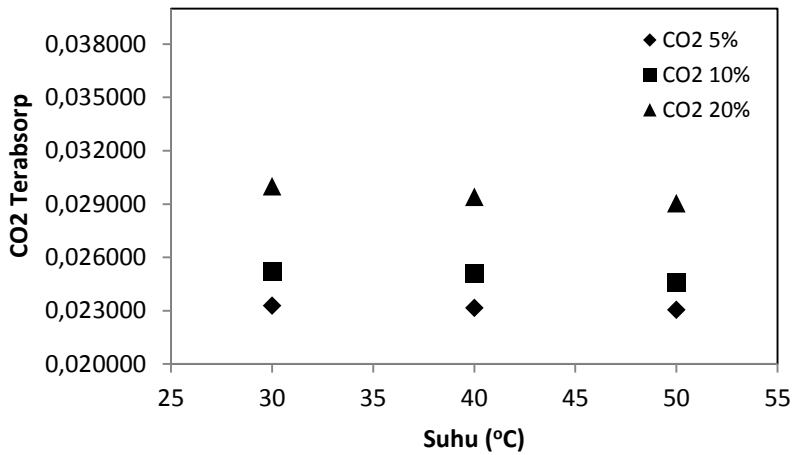
Tabel 4.4 Hasil Perhitungan CO₂ Terabsorp pada suhu 50°C

MDEA (%)	DEA (%)	CO ₂ Terabsorp (mol)		
		CO ₂ 5%	CO ₂ 10%	CO ₂ 20%
0	5	0,023163644	0,025084673	0,029886766
1	4	0,023043686	0,024964661	0,029406729
2	3	0,022683566	0,024964726	0,029526732
3	2	0,022443636	0,025084739	0,029286763
4	1	0,022323753	0,025084738	0,029166709
5	0	0,022443744	0,02496471	0,02905336

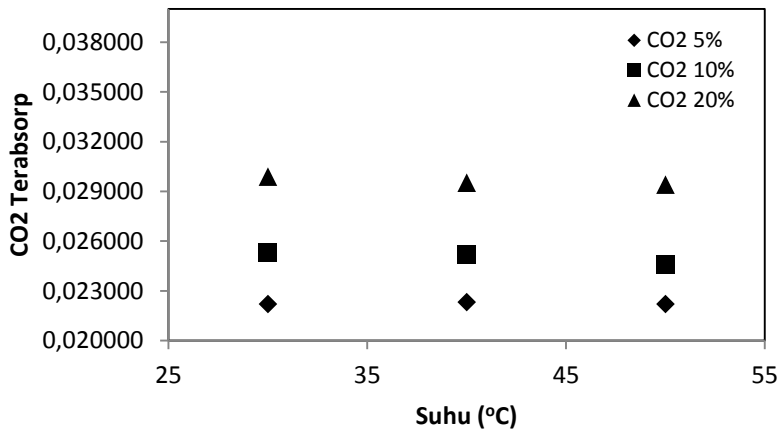
Dari tabel 4.2 sampai tabel 4.4, dapat dibuat grafik hubungan antara suhu dan CO₂ terabsorp sehingga memudahkan untuk melihat perbedaannya, sebagai berikut:



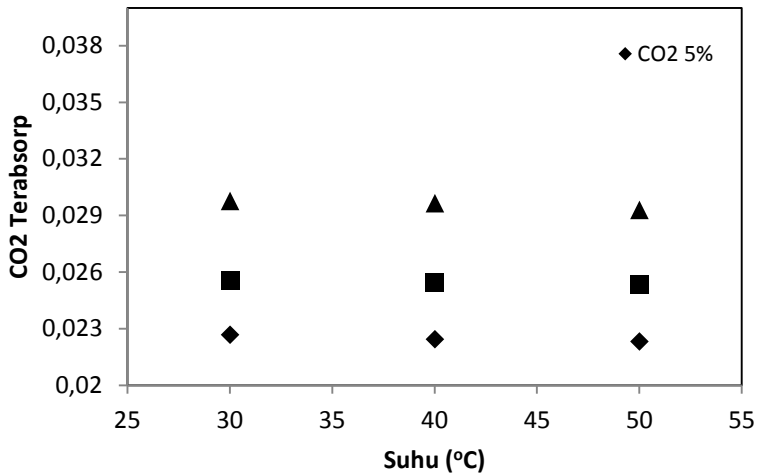
Gambar 4.3 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 0-5%



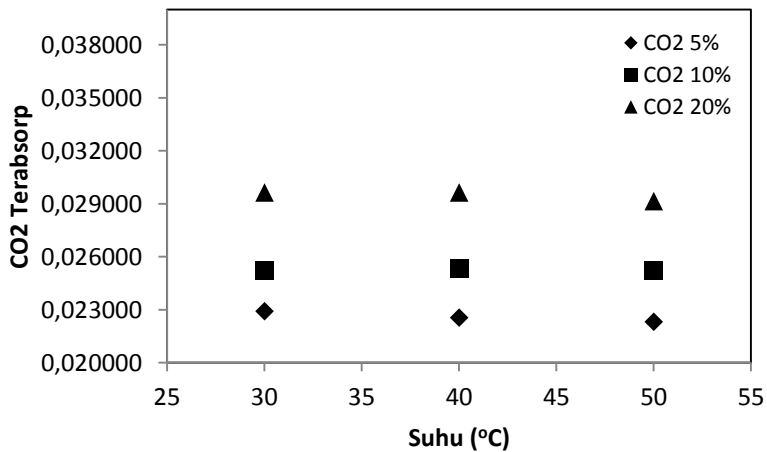
Gambar 4.4 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 1-4%



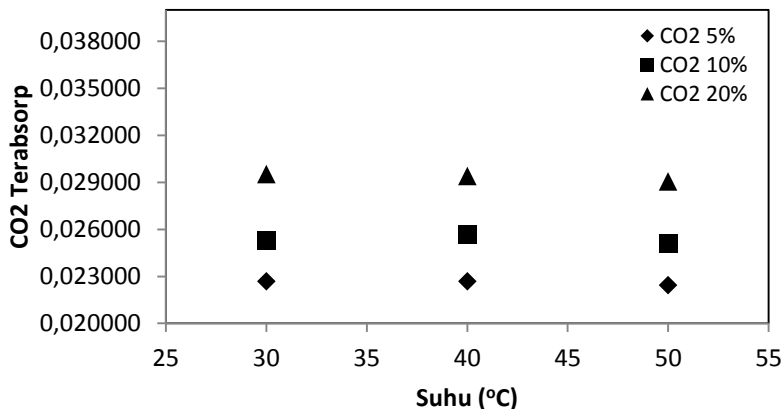
Gambar 4.5 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 2-3%



Gambar 4.6 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 3-2%



Gambar 4.7 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 4-1%



Gambar 4.8 Grafik Hubungan CO₂ Terabsorp vs Suhu dengan komposisi MDEA-DEA 5-0%

Dari grafik pada Gambar 4.3 hingga Gambar 4.8, dapat terlihat hubungan antara suhu dengan jumlah mol CO₂ bereaksi. Dapat dilihat bahwa meningkatnya suhu menyebabkan jumlah mol CO₂ yang terabsorp mengalami penurunan. Hal ini dikarenakan semakin meningkatnya suhu nilai konstanta Henry akan semakin besar, dimana semakin besar konstanta Henry maka akan menurunkan kelarutan gas dalam pelarut.

4.3 Korelasi dengan Model E-NRTL

Untuk melakukan perhitungan korelasi tekanan kesetimbangan dengan menggunakan data fraksi mol komponen pada kondisi kesetimbangan dari eksperimen, dihitung dengan model E-NRTL. Model E-NRTL ini telah cukup baik untuk memprediksi kelakuan larutan elektrolit lemah hingga elektrolit kuat. Selain itu, berdasarkan *Chen and Song* (2004) menyatakan bahwa model E-NRTL (*Electrolyte Non Random Two Liquid*) telah diaplikasikan secara luas untuk menunjukkan sifat-sifat termodinamika dari berbagai macam sistem elektrolit. Misalnya, model ini dapat digunakan untuk menghitung koefisien aktivitas

komponen-komponen larutan elektrolit. Untuk mendapatkan parameter biner yang digunakan dalam perhitungan koefisien aktivitas CO₂ dengan model E-NRTL, maka dilakukan *fitting Average Absolute Relative Deviation (AARD)* antara P_{CO_2} yang didapatkan dari eksperimen dengan P_{CO_2} hasil perhitungan korelasi. Kemudian data yang didapatkan dapat digunakan untuk menghitung tekanan parsial CO₂ hasil korelasi (P_{CO_2}). Hasil perhitungan dapat dilihat pada tabel berikut yang merupakan perbandingan antara P_{CO_2} hasil eksperimen dan hasil korelasi untuk metode *fitting* sebagai berikut:

Tabel 4.5 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 0-5%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	579,40	583,95	0,79%
	40	668,33	644,51	3,56%
	50	806,14	784,88	2,64%
10%	30	722,32	732,87	1,46%
	40	830,49	814,87	1,88%
	50	1033,65	980,25	5,17%
20%	30	1144,24	1166,62	1,96%
	40	1360,92	1392,91	2,35%
	50	1683,77	1614,77	4,10%

Tabel 4.6 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 1-4%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	628,36	643,34	2,38%
	40	725,30	750,08	3,42%
	50	815,32	812,94	0,29%
10%	30	784,80	837,78	6,75%
	40	908,05	943,64	3,92%
	50	997,26	1013,93	1,67%
20%	30	1370,43	1386,94	1,21%
	40	1591,96	1592,44	0,03%
	50	1769,80	1708,75	3,45%

Tabel 4.7 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 2-3%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	810,95	774,05	4,55%
	40	844,26	839,29	0,59%
	50	869,06	913,51	5,12%
10%	30	1004,49	952,27	5,20%
	40	1051,48	1080,99	2,81%
	50	1088,46	1182,88	8,67%
20%	30	1934,50	1827,58	5,53%
	40	2069,08	2059,80	0,45%
	50	2216,39	2239,35	1,04%

Tabel 4.8 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 3-2%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	905,22	861,57	4,82%
	40	946,27	995,58	5,21%
	50	1182,61	1181,71	0,08%
10%	30	1158,12	1123,41	3,00%
	40	1210,83	1267,02	4,64%
	50	1534,50	1569,53	2,28%
20%	30	2400,96	2241,52	6,64%
	40	2630,31	2683,69	2,03%
	50	3518,44	3481,96	1,04%

Tabel 4.9 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 4-1%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	1243,15	1207,57	2,86%
	40	1216,74	1216,74	0,00%
	50	1676,32	1564,52	6,67%
10%	30	1633,47	1563,53	4,28%
	40	1585,38	1699,54	7,20%
	50	2153,15	2100,95	2,42%
20%	30	3811,22	3568,11	6,38%
	40	3828,30	3735,02	2,44%
	50	5624,79	5366,52	4,59%

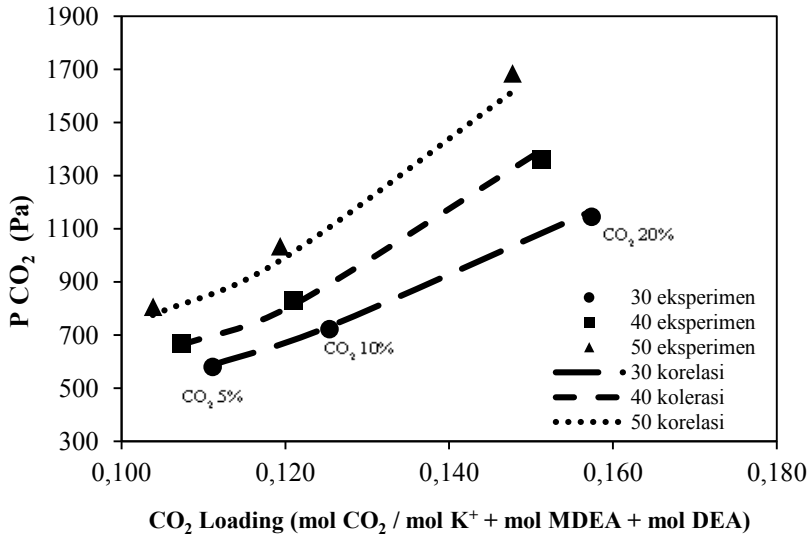
Tabel 4.10 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk konsentrasi MDEA-DEA 5-0%

Konsentrasi Gas CO ₂	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	1308,86	1362,00	4,06%
	40	1548,71	1622,20	4,74%
	50	2311,99	2190,05	5,27%
10%	30	1794,86	1785,65	0,51%
	40	2013,27	2241,58	11,34%
	50	3097,31	3290,63	6,24%
20%	30	4656,02	4489,86	3,57%
	40	5765,47	5523,19	4,20%
	50	9172,83	9178,01	0,06%

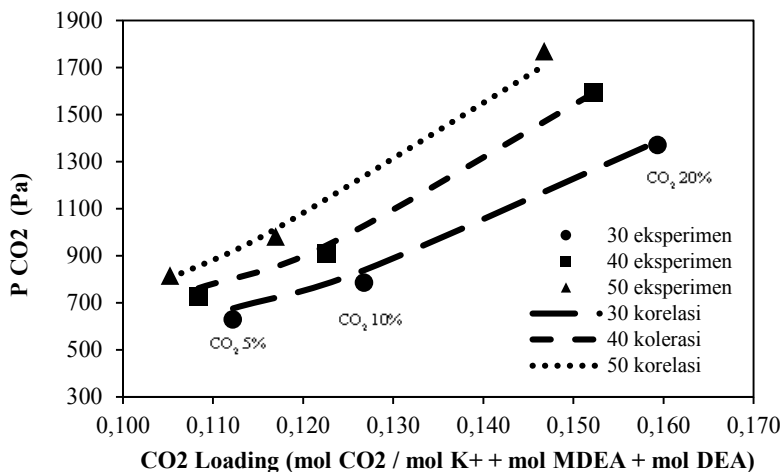
Tabel 4.5 sampai Tabel 4.10 menunjukkan error yang didapatkan antara hasil eksperimen yang telah dilakukan dan hasil dari korelasi e-NRTL. Hasil tersebut menunjukkan bahwa hasil eksperimen yang telah dilakukan tidak berbeda jauh dengan hasil korelasi. Dari tabel tersebut juga menunjukkan hubungan yang berbanding lurus antara suhu dengan tekanan parsial CO₂. Suhu yang semakin tinggi akan meningkatkan tekanan parsial CO₂ dalam larutan. Dari tabel di atas juga dapat dilihat juga bahwa hasil korelasi untuk setiap tekanan parsial gas CO₂ juga meningkat seiring dengan suhu yang meningkat.

Pada setiap kenaikan konsentrasi MDEA dari 0% sampai 5% dapat terlihat bahwa nilai tekanan parsial CO₂ meningkat, baik itu pada eksperimen maupun kolerasinya. Dari hasil tersebut membuktikan bahwa penambahan MDEA sebagai promotor menyebabkan tekanan parsial CO₂ semakin besar sehingga jumlah CO₂ yang terabsorpsi menjadi semakin sedikit.

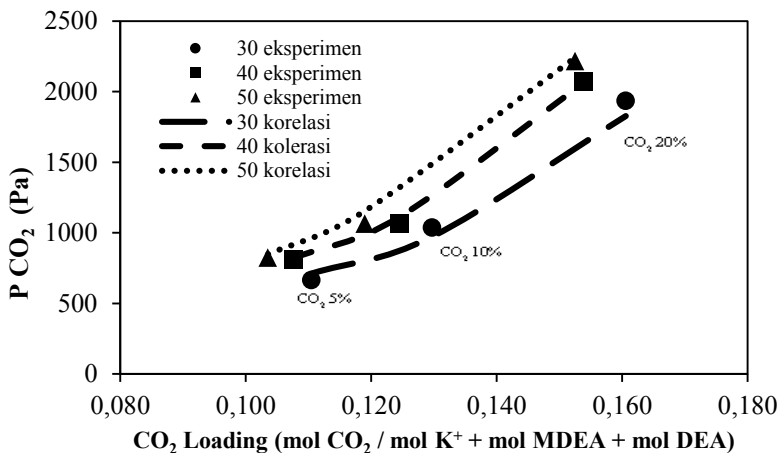
Hubungan antara tekanan parsial CO_2 (P_{CO_2}) baik eksperimen maupun korelasi dari tiap konsentrasi CO_2 dan tiap campuran larutan terhadap CO_2 loading dapat dilihat pada gambar berikut:



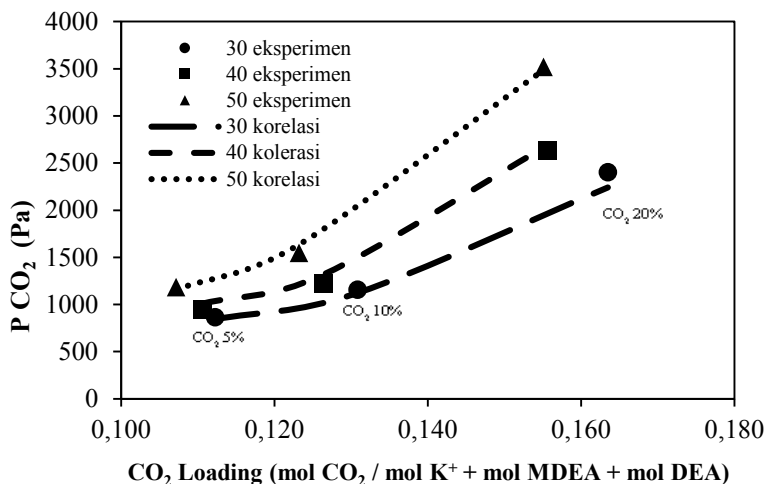
Gambar 4.9 Hubungan Tekanan Parsial CO_2 (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO_2 Loading dengan Promotor MDEA-DEA 0-5%



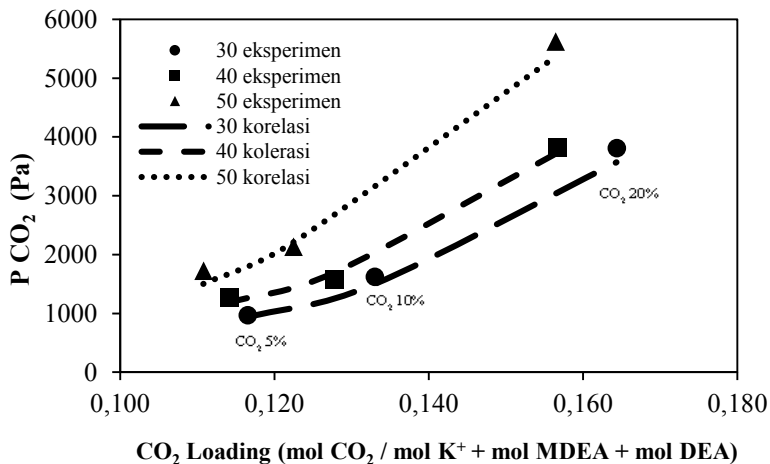
Gambar 4.10 Hubungan Tekanan Parsial CO_2 (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO_2 Loading dengan Promotor MDEA-DEA 1-4%



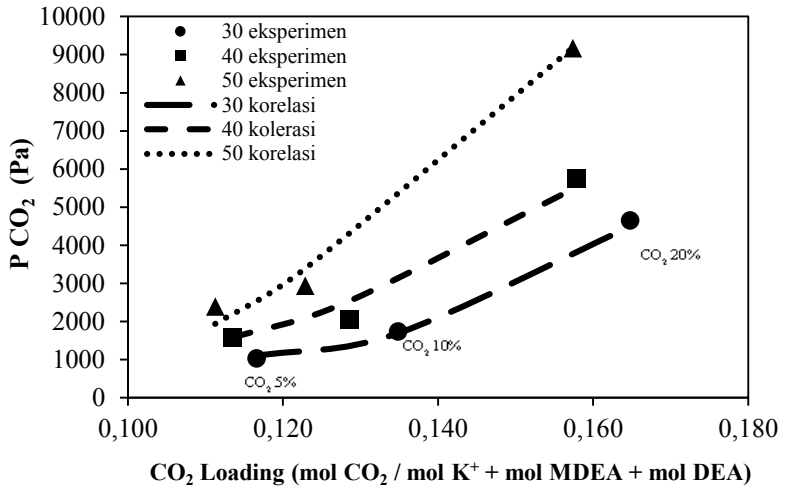
Gambar 4.11 Hubungan Tekanan Parsial CO_2 (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO_2 Loading dengan Promotor MDEA-DEA 2-3%



Gambar 4.12 Hubungan Tekanan Parsial CO_2 (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO_2 Loading dengan Promotor MDEA-DEA 3-2%



Gambar 4.13 Hubungan Tekanan Parsial CO_2 (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO_2 Loading dengan Promotor MDEA-DEA 4-1%



Gambar 4.14 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading dengan Promotor MDEA-DEA 5-0%

Dari Gambar 4.9 hingga Gambar 4.14 dapat terlihat hasil eksperimen maupun hasil korelasi menunjukkan bahwa pada komposisi promotor yang sama, semakin besar konsentrasi gas CO₂ maka CO₂ loading serta tekanan parsial CO₂ juga akan semakin besar. Hal ini disebabkan karena terjadinya kenaikan konsentrasi CO₂ didalam larutan yang pada dasarnya selalu berkesetimbangan dengan konsentrasi CO₂ dalam fase gas (Kurniati dan Panca, 2013). Dari gambar tersebut terlihat pula bahwa kenaikan suhu meningkatkan tekanan parsial CO₂ pada tiap komposisi promotor MDEA-DEA. Besarnya tekanan parsial CO₂ disebabkan oleh nilai konstanta Henry CO₂ pada pelarut MDEA-DEA yang semakin besar pada saat dilakukan penambahan MDEA. Semakin besar nilai konstanta Henry maka semakin kecil solubilitas CO₂ terhadap pelarutnya.

Berdasarkan penjelasan sebelumnya, dapat disimpulkan bahwa jumlah mol CO_2 terabsorb berbanding lurus dengan CO_2 loading. Dengan promotor yang sama, semakin besar jumlah mol CO_2 terabsorb akan meningkatkan nilai CO_2 loading, hal ini dikarenakan CO_2 loading merupakan perbandingan jumlah mol CO_2 terabsorb dengan total jumlah mol pelarutnya.

Pada penelitian ini, model E-NRTL yang digunakan memberikan hasil yang baik pada sistem CO_2 - K_2CO_3 -(MDEA+DEA)- H_2O dengan nilai *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* 4,84% untuk *fitting* pada tiap komposisi campuran promotor MDEA-DEA.

BAB V

KESIMPULAN

Dari hasil eksperimen dan pembahasan, dapat diambil kesimpulan dari penelitian ini, yaitu:

1. Harga konstanta Henry CO_2 bisa didapatkan dengan analogi N_2O . Nilai konstanta Henry yang diperoleh meningkat seiring dengan kenaikan suhu pada range 30-50°C
2. Dengan promotor yang sama semakin meningkatkannya konsentrasi CO_2 serta suhu operasi dapat menaikkan tekanan parsial gas CO_2
3. Meningkatnya konsentrasi umpan CO_2 akan meningkatkan besarnya CO_2 loading rata-rata sebesar 13,75% untuk CO_2 10% dan 41,92% untuk CO_2 20%
4. Hasil korelasi dengan E-NRTL memberikan nilai *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 4,84%

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

APENDIKS

A.1 Perhitungan Eksperimen

Variabel yang digunakan pada eksperimen ini adalah sebagai berikut ini:

Sistem K_2CO_3 -(MDEA+DEA)- H_2O :	
Suhu (T)	= 30 °C, 40 °C, dan 50°C
Kadar K_2CO_3	= 30% massa
Kadar MDEA+DEA	= 0% - 5% massa
Kadar H_2O	= 65%
Komposisi gas	= 0-20% CO_2 – sisanya N_2

Berikut ini adalah contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- a. Variabel yang digunakan untuk contoh perhitungan yaitu larutan 30% K_2CO_3 dengan penambahan 1% MDEA dan 4% DEA serta 65% H_2O , dengan menggunakan gas N_2O .

Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan massa tiap komponen:

Massa larutan ($m_{\text{larutan awal}}$) = 150 g larutan

Dengan komposisi larutan:

% massa K_2CO_3 = 30%

% massa MDEA = 1%

% massa DEA = 4%

% massa H_2O = 65%

Massa tiap-tiap larutan dapat dihitung dengan rumus:

Massa = % massa x $m_{\text{larutan awal}}$

Contoh perhitungan K_2CO_3 sebagai berikut:

$$\begin{aligned} m_{K_2CO_3} &= \% \text{ massa } K_2CO_3 \times m_{\text{larutan awal}} \\ &= 30\% \times 150 \text{ g} \\ &= 45 \text{ g} \end{aligned}$$

Perhitungan massa MDEA, DEA, dan H_2O dapat dilihat pada Tabel A.1 berikut:

Tabel A.1 Hasil Perhitungan Massa Tiap Komponen
Untuk 1% Massa MDEA dan 4% Massa DEA

Senyawa	Komposisi (% Massa)	Massa (gram)	n (mol)	Fraksi mol
K ₂ CO ₃	30	45	0,32609	0,05610
MDEA	1	1,5	0,0126	0,00217
DEA	4	6	0,0571	0,00983
H ₂ O	65	97,5	5,416	0,93228
Total	100	150	5,81179	1

Menghitung adanya N₂O terabsorb

Untuk menghitung mol N₂O terabsorb, dapat digunakan rumus sebagai berikut:

$$P = 10^5 \text{ Pa}$$

$$T = 30 \text{ }^\circ\text{C} = 303,15 \text{ K}$$

$$\text{Volume sampel : } 20 \text{ mL} = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^3$$

$$\Delta V \text{ gas} = 12,2 \text{ mL} = 10,2 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$\begin{aligned} \text{Volume gas yang terabsorb} &= \text{Volume sampel} - \Delta V \text{ gas} \\ &= 2 \times 10^{-5} - 10,2 \times 10^{-6} \\ &= 0,0000098 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N₂O (C_A^{*})

$$\begin{aligned} \text{mol total gas terabsorp}(n) &= \frac{PV}{RT} \\ &= \frac{10^5 \cdot 0,0000098}{8,314 \times 303,15} \\ &= 0,0003940 \text{ mol} \end{aligned}$$

Hasil Perhitungan untuk mol N₂O terabsorb ditunjukkan pada Tabel A.2

Tabel A.2 Perhitungan Mol N₂O Terabsorb tiap %MDEA dan %DEA

%MDEA	%DEA	Suhu (°C)	N ₂ O Terabsorb (mol)
0	5	30	0,0004261
		40	0,0003580
		50	0,0002829
1	4	30	0,0003940
		40	0,0003308
		50	0,0002829
2	3	30	0,0003055
		40	0,0002841
		50	0,0002640
3	2	30	0,0002734
		40	0,0002530
		50	0,0001923
4	1	30	0,0001970
		40	0,0001946
		50	0,0001358
5	0	30	0,0001849
		40	0,0001518
		50	0,0000981

Menghitung Konstanta Henry N₂O Dalam Solvent

- Mol total yang terabsorp (n) = 3,401.10⁻⁷ kmol

$$\begin{aligned}
 C_{A^*} &= \frac{\text{mol total gas terabsorp}}{\text{Volumeliquid}} \\
 &= \frac{3,940.10^{-7}}{20} \\
 &= 0,0197 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}
 \end{aligned}$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam larutan K_2CO_3 +MDEA+DEA

$$\begin{aligned}
 P_{H_2O}^v / bar &= 1.33567 \times 10^6 \exp(-5243/T(K)) \\
 &= 4,17068 kPa \\
 P_{N_2O} &= P_{total} - x_{H_2O} \cdot P_{H_2O}^v - x_{K_2CO_3} \cdot P_{K_2CO_3} - x_{so\ lent} \cdot P_{a\ min\ e} \\
 &= 10^5 - (0,93228)(4,17068) - 0 - 0 \\
 &= 97,4368 kPa
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_A &= \frac{P_A}{C_A^*} \\
 &= \frac{97,4368}{0,0197} \\
 &= 4946,2701 \frac{kPa \cdot m^3}{kmol}
 \end{aligned}$$

Menghitung Konstanta Henry CO_2 menggunakan analogi N_2O

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam air

$$H_{CO_2, water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam air

$$H_{N_2O, water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam larutan K_2CO_3 +MDEA+DEA dengan menggunakan rumus analogi N_2O

$$\frac{H_{CO_2, a\ min\ e}}{H_{N_2O, a\ min\ e}} = \frac{H_{CO_2, water}}{H_{N_2O, waer}}$$

Tabel A.3 Hasil Perhitungan Konstanta Henry N₂O dan CO₂ tiap %MDEA dan %DEA

%MDEA	%DEA	Suhu (°C)	H N ₂ O (kPa.m ³ /kmol)	H CO ₂ (kPa.m ³ /kmol)
0	5	30	4573,0194	3328,9821
		40	5282,6447	3749,5594
		50	6363,8356	4410,4154
1	4	30	4946,2701	3600,6942
		40	5717,5680	4058,2628
		50	6362,6037	4410,2547
2	3	30	6378,0114	4642,9468
		40	6657,3046	4725,2769
		50	6816,8268	4725,1006
3	2	30	7128,2834	5189,1159
		40	7476,5105	5306,7397
		50	9356,0876	6485,1955
4	1	30	9892,12973	7201,1388
		40	9719,2625	6898,6188
		50	13253,9735	9187,0249
5	0	30	10537,2187	7670,6895
		40	12460,3350	8844,2000
		50	18350,9852	12720,0313

b. Perhitungan menggunakan gas CO₂

Variabel yang digunakan untuk contoh perhitungan yaitu larutan 30% K₂CO₃ dengan penambahan 1% MDEA dan 4% DEA serta 65% H₂O, dengan komposisi gas 5% CO₂ - 95% N₂. Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan volume larutan awal:

Untuk mendapatkan volume larutan yang digunakan, massa larutan ditimbang menggunakan piknometer sehingga dapat dihitung densitas larutannya.

massa piknometer kosong	= 13,3780 g
massa piknometer + aquades	= 23,4248 g
massa aquades	= (23,4248 - 13,3780) g
	= 10,0468 g
dengan massa jenis aquades	= 1 g/mL
volume piknometer	= (10,0468 g)/(1 g/mL)
	= 10,0468 mL
massa piknometer + larutan	= 26,1978 g
massa larutan	= (26,1978 - 13,3780) g
	= 12,8198 g
densitas larutan awal	= (12,8198 g) / (10,0468)
	= 1,2760 g/mL
Sehingga,	
volume larutan awal	= (100 g)/(1,2760 g/mL)
	= 117,5541 mL

Analisa komposisi karbonat dan bikarbonat mula-mula dilakukan dengan mengambil sampel sebanyak 5 ml larutan.

Analisa Awal Larutan:

- i. Menganalisa Adanya Karbonat (CO_3^{2-}) dan Bikarbonat (HCO_3^-) Mula-Mula

Untuk menganalisa adanya karbonat (CO_3^{2-}) dan bikarbonat (HCO_3^-) dalam larutan awal, larutan awal dititrasi dengan menggunakan titran HCl menggunakan mikroburet.

Titration 1

Volume sampel larutan = 5 ml
menggunakan indikator PP dan titran HCl 3N
Dibutuhkan larutan HCl sebesar:
Volume HCl (V_{HCl}) = 5 ml

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} &= M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}} \\ &= 3 \text{ N} \times 5 \text{ ml} \\ &= 15 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 20 mL larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{mol CO}_3^{2-} \text{ mula - mula} &= \frac{15 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} \\ &= 60 \text{ mmol} \\ &= 0,06 \text{ mol}\end{aligned}$$

Titrasi 2

Volume sampel larutan = 5 mL
menggunakan indikator MO dan titran HCl 3N

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

$$\text{Volume HCl (V}_{\text{HCl}}) = 9 \text{ mL}$$

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) mula-mula dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

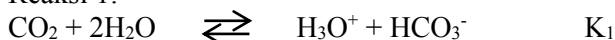
$$\begin{aligned}\text{Mol HCO}_3^- \text{ mula-mula} &= (M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}}) - \text{Mol CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} \\ &= (3 \text{ N} \times 9 \text{ ml}) - 60 \text{ mmol} \\ &= 12 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

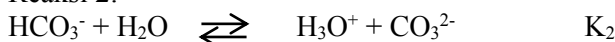
$$\begin{aligned}\text{mol HCO}_3^- \text{ mula - mula} &= \frac{12 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} \\ &= 48 \text{ mmol} \\ &= 0,048 \text{ mol}\end{aligned}$$

- ii. Menghitung Adanya CO₂ Terlarut Mula-Mula
Untuk menghitung mol CO₂ terlarut mula-mula, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut:

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

Dengan nilai konstanta C pada persamaan tersebut pada Tabel A.4 berikut:

Tabel A.4 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

(Autsgen dan Rocelle, 1991)

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \text{Dengan suhu} &= 30 \text{ }^\circ\text{C} \\ &= (30 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15) \text{ K} \\ &= 305,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\begin{aligned} \ln K_1 &= 231,465 + \frac{-12.092,1}{303,15} + (-36,7816 \ln 303,15) + (0 \times 303,15) \\ &= -18,6 \\ K_1 &= 8,36 \cdot 10^{-9} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\begin{aligned}\ln K_2 &= 216,049 + \frac{-12.431,7}{303,15} + (-35,4819 \ln 303,15) + (0 \times 303,15) \\ &= -27,71 \\ K_2 &= 9,264 \cdot 10^{-13}\end{aligned}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.5 berikut:

Tabel A.5 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Awal Untuk 20% Mol CO₂ pada suhu 30°C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	8,36 · 10 ⁻⁹
Reaksi 2	9,264 · 10 ⁻¹³

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$\begin{aligned}[HCO_3^-] &= \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,048 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,0024 \text{ mol/ml}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[CO_3^{2-}] &= \frac{\text{mol } CO_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,060 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,003\end{aligned}$$

maka:

$$\begin{aligned}
 [CO_2 \text{ terlarut}] &= \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]} \\
 &= \frac{9,264 \cdot 10^{-13} \times 0,00241^2}{8,36 \cdot 10^{-9} \times 0,0030} \\
 &= 0,000 \text{ mol/ml}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 CO_2 \text{ terlarut mula-mula} &= [CO_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}} \\
 &= 0 \text{ mol/mL} \times 20 \text{ mL} \\
 &= 0 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Analisa Akhir Larutan:

- a. Menganalisa Jumlah Bikarbonat (HCO_3^-) Akhir
 Untuk menganalisa jumlah bikarbonat (HCO_3^-) akhir, dilakukan titrasi dengan menggunakan titran HCl.

Titrasi 1

Volume sampel larutan = 5 ml

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 N

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 5,74 ml

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{Mol } CO_3^{2-} \text{ akhir} &= M_{HCl} \times V_{HCl} \\
 &= 3 \text{ N} \times 5,74 \text{ ml} \\
 &= 17,22 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{mol } CO_3^{2-} \text{ akhir} &= \frac{17,22 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} \\
 &= 68,88 \text{ mmol} \\
 &= 0,0689 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Titrasi 2

Volume sampel larutan = 5 ml

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 N

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 9,62 ml

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol } \text{HCO}_3^- \text{ akhir} &= (M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}}) - \text{Mol } \text{CO}_3^{2-} \text{ akhir} \\ &= (3 \text{ N} \times 9,62 \text{ ml}) - 17,22 \text{ mmol} \\ &= 11,64 \text{ mmol}\end{aligned}$$

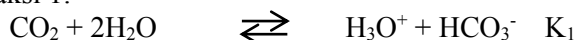
Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut :

$$\begin{aligned}\text{mol } \text{HCO}_3^- \text{ akhir} &= \frac{11,64 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} = 46,56 \text{ mmol} \\ &= 0,04656 \text{ mol}\end{aligned}$$

b. Menghitung adanya CO_2 terlarut akhir

Untuk menghitung mol CO_2 terlarut akhir, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut :

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

(Jurnal Autsgen dan Rocelle tahun 1991)

Konstanta C pada persamaan tersebut juga diperoleh dari Jurnal Autsgen dan Rochelle tahun 1991, seperti pada Tabel A.6 berikut:

Tabel A.6 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{Dengan T sistem} &= 30,2 \text{ }^{\circ}\text{C} \\
 &= (30,2 \text{ }^{\circ}\text{C} + 273.15) \text{ K} \\
 &= 303,35 \text{ K}
 \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\begin{aligned}
 \ln K_1 &= 231,465 + \frac{-12.092,1}{303,35} + (-36,7816 \ln 303,35) + (0 \times 303,35) \\
 &= -18,6 \\
 K_1 &= 8,36 \cdot 10^{-9}
 \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\begin{aligned}
 \ln K_2 &= 216,049 + \frac{-12.431,7}{303,35} + (-35,4819 \ln 303,35) + (0 \times 303,35) \\
 &= -27,71 \\
 K_2 &= 9,264 \cdot 10^{-13}
 \end{aligned}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.7 berikut:

Tabel A.7 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 20% Mol CO₂ pada suhu 30° C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	8,36 . 10 ⁻⁹
Reaksi 2	9,264 . 10 ⁻¹³

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$\begin{aligned} [HCO_3^-] &= \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,04656 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,002328 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [CO_3^{2-}] &= \frac{\text{mol } CO_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,0689 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,00344 \text{ mol/ml} \end{aligned}$$

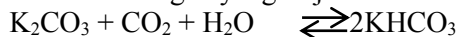
maka:

$$\begin{aligned} [CO_2 \text{ terlarut}] &= \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]} \\ &= \frac{9,264 \times 10^{-13} \times (0,002328)^2}{8,36 \times 10^{-9} \times 0,00344} \\ &= 1,743 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mL} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Mol } CO_2 \text{ terlarut} &= [CO_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}} \\ &= 1,743 \cdot 10^{-7} \text{ mol/ml} \times 20 \text{ ml} \\ &= 3,487 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \end{aligned}$$

- c. Menghitung Mol CO_2 yang bereaksi

Reaksi kesetimbangan yang terjadi:



Berdasarkan reaksi kesetimbangan tersebut, dapat dihitung jumlah mol CO_2 yang bereaksi sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} &= \frac{1}{2} \times \text{mol HCO}_3^- \text{ akhir} \\ &= \frac{1}{2} \cdot 0,04656 \text{ mol} \\ &= 0,02328 \text{ mol}\end{aligned}$$

d. Menghitung Mol CO₂ yang terabsorb

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_2 \text{ terabsorb} &= \text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} + \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\ &= 0,02328 \text{ mol} + 3,49 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \\ &= 0,02383 \text{ mol}\end{aligned}$$

Menghitung Densitas Larutan:

Untuk menghitung densitas larutan akhir, dilakukan penimbangan massa larutan dengan menggunakan piknometer. Penimbangan tersebut dilakukan sebanyak tiga kali.

Data yang diperoleh sebagai berikut:

Massa pikno dan larutan

$$\text{Massa pikno dan larutan} = 26,2195$$

Massa larutan

Massa larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned}\text{Massa larutan} &= \text{Massa pikno dan larutan} - \text{Massa} \\ \text{pikno kosong} &= 26,2195 \text{ g} - 13,3780 \text{ g} \\ &= 12,8415 \text{ g}\end{aligned}$$

Densitas larutan

Densitas larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned}\text{Densitas larutan} &= \frac{\text{Massa larutan}}{\text{Volume pikno}} \\ &= \frac{12,8415 \text{ g}}{10,0468 \text{ ml}} \\ &= 1,2781682 \text{ g/ml}\end{aligned}$$

Menghitung massa tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Massa tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk kalium karbonat (K_2CO_3)

$$\begin{aligned}\text{Mol } K_2CO_3 &= \text{Mol } CO_3^{2-} \\ &= 0,0689 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM } K_2CO_3 = 138 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa } K_2CO_3 &= \text{Mol } K_2CO_3 \times \text{BM } K_2CO_3 \\ &= 0,0689 \text{ mol} \times 138 \text{ g/mol} \\ &= 9,51 \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk kalium bikarbonat ($KHCO_3$)

$$\begin{aligned}\text{Mol } KHCO_3 &= \text{Mol } HCO_3^- \\ &= 0,04656 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM } KHCO_3 = 100 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa } KHCO_3 &= \text{Mol } KHCO_3 \times \text{BM } KHCO_3 \\ &= 0,04656 \text{ mol} \times 100 \text{ g/mol} \\ &= 4,66 \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk *Methyl diethanolamine* (MDEA)

$$\text{Massa MDEA} = 1,5 \text{ gram}$$

$$\begin{aligned}\text{mol MDEA} &= \text{massa MDEA} / \text{BM MDEA} \\ &= (1,5 \text{ g}) / (119 \text{ g/mol}) \\ &= 0,0126 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk *diethanolamine* (DEA)

$$\text{Massa DEA} = 6 \text{ g}$$

$$\begin{aligned}\text{mol DEA} &= \text{massa DEA} / \text{BM DEA} \\ &= (6 \text{ g}) / (105 \text{ g/mol}) \\ &= 0,0571 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO_2)

$$\begin{aligned}\text{Mol } CO_2 &= \text{Mol } CO_2 \text{ terlarut} \\ &= 3,487 \cdot 10^{-6} \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM } CO_2 = 44 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}
 \text{Massa CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \times \text{BM CO}_2 \\
 &= 3,487 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \times 44 \text{ g/mol} \\
 &= 1,534 \cdot 10^{-5} \text{ gram}
 \end{aligned}$$

Untuk Air (H₂O)

$$\begin{aligned}
 \text{Massa H}_2\text{O} &= \text{Massa larutan akhir} - (\text{Massa K}_2\text{CO}_3 + \\
 &\quad \text{Massa KHCO}_3 + \text{Massa MDEA} + \text{Massa} \\
 &\quad \text{DEA} + \text{Massa CO}_2) \\
 &= 9,9 \text{ gram}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol H}_2\text{O} &= (9,90 \text{ g}) / (18 \text{ g/mol}) \\
 &= 0,55 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Menghitung mol tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Mol tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk ion karbonat (CO₃²⁻)

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol CO}_3^{2-} = 0,0689 \text{ mol}$$

Untuk ion bikarbonat (HCO₃⁻)

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol HCO}_3^- = 0,0466 \text{ mol}$$

Untuk ion kalium (K⁺)

$$\begin{aligned}
 \text{Mol K}^+ &= (2 \times \text{Mol CO}_3^{2-}) + \text{Mol HCO}_3^- \\
 &= (2 \times 0,0689 \text{ mol}) + 0,0466 \text{ mol} \\
 &= 0,1378 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Untuk Methyl diethanolamine (MDEA)

$$\text{Mol MDEA} = 0,0126 \text{ mol}$$

Untuk diethanolamine (DEA)

$$\text{Mol DEA} = 0,0571 \text{ mol}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO₂)

Berdasarkan hasil perhitungan mol CO₂ terlarut, diperoleh:

$$\begin{aligned}
 \text{Mol CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\
 &= 3,487 \cdot 10^{-6} \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Untuk Air (H₂O)

Berdasarkan hasil perhitungan massa H₂O dalam larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol H}_2\text{O} = 0,5501 \text{ mol}$$

Untuk Larutan

$$\begin{aligned}\text{Mol Larutan akhir} &= (\text{Mol CO}_3^{2-} + \text{Mol HCO}_3^- + \text{Mol K}^+ \\ &\quad + \text{Mol MDEA} + \text{Mol DEA} + \text{Mol CO}_2 + \text{Mol H}_2\text{O}) \\ &= 0,0689 + 0,0466 + 0,1378 + 0,0126 \\ &\quad + 0,0571 + 3,487 \cdot 10^{-6} + 0,5501 \\ &= 0,8731 \text{ mol}\end{aligned}$$

Mol dan komposisi tiap-tiap komponen dapat dilihat pada Tabel A.8.

Tabel A.8 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk CO₂ 5% N₂ 95% pada suhu 30° C

Komponen	Mol (mol)	Fraksi mol
CO ₃ ²⁻	0,0603	0,0683
HCO ₃ ⁻	0,05547	0,0628
K ⁺	0,1206	0,1365
MDEA	0,008	0,0095
DEA	0,038	0,0431
CO ₂	5,736.10 ⁻⁶	6,494.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,600	0,6797
Total	0,883	1

Menghitung CO₂ Loading:

CO₂ loading dapat dihitung dengan rumus berikut:

$$\begin{aligned}\text{CO}_2 \text{ Loading} &= \frac{\text{mol CO}_2 \text{ terabsorb}}{\text{mol K}^+ + \text{mol MDEA} + \text{mol DEA}} \\ &= \frac{0,0233}{0,125 + 0,008 + 0,038} \\ &= 0,1122\end{aligned}$$

Fraksi mol H₂O di gas :

Air di fasa gas dalam keadaan jenuh sehingga,

$$P_{H_2O} = P_{H_2O}^{sat} \\ = \exp (16.2620 - (3799.89 / ((T - 273.15) + 226.35)))$$

Pada $T = 305,15 \text{ K}$

maka,

$$P_{H_2O}^{sat} = 4265,25$$

Menghitung Tekanan Parsial secara Eksperimen pada larutan :

$$P_{CO_2} = H_{CO_2} \cdot x_{CO_2} \\ = 3604,13672 \frac{kPa \cdot m^3}{kmol} \cdot 3,487 \cdot 10^{-6} kmol \cdot \frac{1}{2 \cdot 10^{-5} m^3} \\ = 0,63 kPa \\ = 6258,36 Pa$$

Berikut penabelan hasil perhitungan komposisi masing-masing komponen di liquid :

Tabel A.9 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas CO_2 5% N_2 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO_3^{2-}	0,0696	0,0735	0,0727	0,0768	0,0758	0,0814
HCO_3^-	0,0468	0,0494	0,0466	0,0491	0,0463	0,0497
K^+	0,1392	0,1470	0,1454	0,1535	0,1517	0,1628
MDEA	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0754	0,0714	0,0754	0,0714	0,0767
CO_2	$3,481 \cdot 10^{-6}$	$3,676 \cdot 10^{-6}$	$3,565 \cdot 10^{-6}$	0,0000	$3,644 \cdot 10^{-6}$	0,0000
H_2O	0,6199	0,6546	0,6112	0,6452	0,5862	0,6293
Total	0,9469	1,0000	0,9474	1,0000	0,9315	1,0000

Tabel A.10 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 5% N₂ 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0689	0,0789	0,0720	0,0832	0,0746	0,0870
HCO ₃ ⁻	0,0466	0,0533	0,0463	0,0535	0,0461	0,0537
K ⁺	0,1378	0,1578	0,1440	0,1663	0,01493	0,1740
MDEA	0,0126	0,0144	0,0126	0,0146	0,0126	0,0147
DEA	0,0571	0,0655	0,0571	0,0660	0,0571	0,0666
CO ₂	3,487.10 ⁻⁶	3,994.10 ⁻⁶	3,577.10 ⁻⁶	4,132.10 ⁻⁶	3,686.10 ⁻⁶	4,297.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5501	0,6301	0,5336	0,6164	0,5181	0,6040
Total	0,8731	1,0000	0,8657	1,0000	0,8579	1,0000

Tabel A.11 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 5% N₂ 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0679	0,0856	0,0703	0,0891	0,0732	0,0945
HCO ₃ ⁻	0,0463	0,0584	0,0458	0,0581	0,0456	0,0589
K ⁺	0,1358	0,1712	0,1406	0,1781	0,1464	0,1890
MDEA	0,0252	0,0318	0,0252	0,0319	0,0252	0,0325
DEA	0,0429	0,0540	0,0429	0,0543	0,0429	0,0553
CO ₂	3,487.10 ⁻⁶	4,408.10 ⁻⁶	3,573.10 ⁻⁶	4,525.10 ⁻⁶	3,673.10 ⁻⁶	4,742.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4752	0,5990	0,4647	0,5886	0,4413	0,5697
Total	0,7933	1,0000	0,7896	1,0000	0,7745	1,0000

Tabel A.12 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 5% N₂ 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0674	0,095	0,0694	0,0986	0,0715	0,1024
HCO ₃ ⁻	0,0461	0,0649	0,0454	0,0645	0,0449	0,0642
K ⁺	0,1349	0,1900	0,1387	0,1973	0,1430	0,2048
MDEA	0,0378	0,0533	0,0378	0,0538	0,0378	0,0541
DEA	0,0286	0,0402	0,0286	0,0406	0,0286	0,0409
CO ₂	3,4830.10 ⁻⁶	4,906.10 ⁻⁶	3,566.10 ⁻⁶	5,072.10 ⁻⁶	3,63.10 ⁻⁶	5,205.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3952	0,5566	0,3833	0,5451	0,3727	0,5336
Total	0,7099	1,0000	0,7032	1,0000	0,6986	1,0000

Tabel A.13 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 5% N₂ 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0674	0,1079	0,0691	0,1105	0,0706	0,0113
HCO ₃ ⁻	0,0458	0,0734	0,0451	0,0721	0,0446	0,0717
K ⁺	0,1349	0,2159	0,1382	0,2211	0,1411	0,2266
MDEA	0,0504	0,0807	0,0504	0,0806	0,0504	0,0809
DEA	0,0143	0,0229	0,0143	0,0228	0,0143	0,0229
CO ₂	3,447.10 ⁻⁶	5,516.10 ⁻⁶	3,627.10 ⁻⁶	0,0000	3,638.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,3120	0,4993	0,3082	0,4928	0,3019	0,4846
Total	0,6249	1,0000	0,6254	1,0000	0,6229	1,0000

Tabel A.14 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 5% N₂ 95%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0677	0,1252	0,0689	0,1292	0,0703	0,1323
HCO ₃ ⁻	0,0456	0,0843	0,0449	0,0842	0,0444	0,0835
K ⁺	0,1354	0,2503	0,1378	0,2583	0,1406	0,2645
MDEA	0,0630	0,1166	0,0630	0,1182	0,0630	0,1185
DEA	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CO ₂	3,407.10 ⁻⁶	6,300.10 ⁻⁶	3,52.10 ⁻⁶	0,0000	3,614.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,2291	0,4236	0,2187	0,4102	0,2133	0,4012
Total	0,5407	1,0000	0,5333	1,0000	0,5317	1,0000

Tabel A.15 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0648	0,0672	0,0679	0,0712	0,0694	0,0735
HCO ₃ ⁻	0,0504	0,0523	0,0502	0,0526	0,0502	0,0531
K ⁺	0,1296	0,1344	0,1358	0,1425	0,1387	0,1469
MDEA	0,0000	0,0000	0,000	0,000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0741	0,0714	0,0749	0,0714	0,0756
CO ₂	4,34.10 ⁻⁶	4,5.10 ⁻⁶	4,430.10 ⁻⁶	0,0000	4,673.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,6481	0,6721	0,6280	0,6587	0,6146	0,6509
Total	0,9644	1,0000	0,9534	1,0000	0,9443	1,0000

Tabel A.16 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0646	0,0740	0,0674	0,0776	0,0689	0,0794
HCO ₃ ⁻	0,0504	0,0577	0,0502	0,0577	0,0499	0,0576
K ⁺	0,1291	0,1479	0,1349	0,1551	0,1378	0,1588
MDEA	0,0126	0,0144	0,0126	0,0145	0,0126	0,0145
DEA	0,0571	0,0655	0,0571	0,0657	0,0571	0,0659
CO ₂	4,359.10 ⁻⁶	4,994.10 ⁻⁶	4,478.10 ⁻⁶	5,15.10 ⁻⁶	4,661.10 ⁻⁶	5,374.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5590	0,6404	0,5473	0,6294	0,5409	0,6237
Total	0,8728	1,0000	0,8695	1,0000	0,8672	1,0000

Tabel A.17 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0638	0,0797	0,0658	0,0830	0,0679	0,0871
HCO ₃ ⁻	0,0502	0,0626	0,0499	0,0630	0,0499	0,0640
K ⁺	0,1277	0,1594	0,1315	0,1660	0,1358	0,1743
MDEA	0,0252	0,0315	0,0252	0,0318	0,0252	0,0323
DEA	0,0429	0,0535	0,0429	0,0541	0,0429	0,0550
CO ₂	4,359.10 ⁻⁶	5,442.10 ⁻⁶	4,532.10 ⁻⁶	5,720.10 ⁻⁶	4,726.10 ⁻⁶	6,063.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4914	0,6134	0,4770	0,6021	0,4577	0,5872
Total	0,8011	1,000	0,7923	1,0000	0,7795	1,0000

Tabel A.18 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0634	0,089	0,0665	0,0960	0,0684	0,0993
HCO ₃ ⁻	0,0506	0,0712	0,0506	0,0731	0,0502	0,0728
K ⁺	0,1267	0,1781	0,1330	0,1920	0,1368	0,1985
MDEA	0,0378	0,0531	0,0378	0,0546	0,0378	0,0549
DEA	0,0286	0,0402	0,0286	0,0413	0,0286	0,0415
CO ₂	4,481.10 ⁻⁶	6,297.10 ⁻⁶	4,613.10 ⁻⁶	6,661.10 ⁻⁶	4,739.10 ⁻⁶	6,877.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4044	0,5684	0,3761	0,5430	0,3673	0,5331
Total	0,7115	1,0000	0,6925	1,000	0,6891	1,0000

Tabel A.19 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0631	0,1010	0,0667	0,1091	0,0684	0,1125
HCO ₃ ⁻	0,0509	0,0814	0,0506	0,0828	0,0502	0,0825
K ⁺	0,1262	0,2020	0,1334	0,2182	0,1368	0,2251
MDEA	0,0504	0,0807	0,0504	0,0825	0,0504	0,0830
DEA	0,0143	0,0229	0,0143	0,0234	0,0143	0,0235
CO ₂	4,537.10 ⁻⁶	7,261.10 ⁻⁶	4,596.10 ⁻⁶	0,000	4,739.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,3199	0,5120	0,2959	0,4840	0,2878	0,4734
Total	0,6248	1,0000	0,6114	1,000	0,6078	1,0000

Tabel A.20 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 10% N₂ 90%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0629	0,1168	0,0658	0,1255	0,0682	0,1319
HCO ₃ ⁻	0,0509	0,0945	0,0502	0,0958	0,0499	0,0966
K ⁺	0,1258	0,2337	0,1315	0,2511	0,1363	0,2639
MDEA	0,0630	0,1171	0,0630	0,1203	0,0630	0,1220
DEA	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CO ₂	4,558.10 ⁻⁶	8,468.10 ⁻⁶	4,575.10 ⁻⁶	0,0000	4,710.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,2357	0,4379	0,2133	0,4073	0,1992	0,3856
Total	0,5382	1,0000	0,5238	1,0000	0,5166	1,0000

Tabel A.21 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 0% MDEA dan 5% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0600	0,0616	0,0631	0,0677	0,0650	0,0706
HCO ₃ ⁻	0,0602	0,0619	0,0598	0,0641	0,0595	0,0646
K ⁺	0,1200	0,1232	0,1262	0,1354	0,1301	0,1411
MDEA	0,0000	0,0000	0,00000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0733	0,0714	0,0766	0,0714	0,0775
CO ₂	6,695.10 ⁻⁶	6,874.10 ⁻⁶	6,766.10 ⁻⁶	0,0000	7,017.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,6623	0,6800	0,6115	0,6561	0,5957	0,6463
Total	0,9740	1,0000	0,9321	1,0000	0,9218	1,0000

Tabel A.22 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% MDEA dan 4% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0593	0,0671	0,0617	0,072	0,0641	0,0752
HCO ₃ ⁻	0,0600	0,0679	0,0588	0,0686	0,0581	0,0681
K ⁺	0,1186	0,1341	0,1234	0,1439	0,1282	0,1503
MDEA	0,0126	0,0143	0,0126	0,0147	0,0126	0,0148
DEA	0,0571	0,0646	0,0571	0,0667	0,0571	0,0670
CO ₂	6,728.10 ⁻⁶	7,612.10 ⁻⁶	6,695.10 ⁻⁶	7,851.10 ⁻⁶	6,821.10 ⁻⁶	8,001.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5763	0,6520	0,5434	0,6341	0,5324	0,6245
Total	0,8839	1,0000	0,8570	1,0000	0,8535	1,0000

Tabel A.23 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% MDEA dan 3% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0590	0,0735	0,0619	0,0806	0,0624	0,0816
HCO ₃ ⁻	0,0598	0,0744	0,0590	0,0768	0,0588	0,0769
K ⁺	0,1181	0,1471	0,1238	0,1611	0,1248	0,1632
MDEA	0,0252	0,0314	0,0252	0,0328	0,0252	0,0330
DEA	0,0429	0,0534	0,0429	0,0558	0,0429	0,0560
CO ₂	6,691.10 ⁻⁶	8,333.10 ⁻⁶	6,732.10 ⁻⁶	8,757.10 ⁻⁶	7,164.10 ⁻⁶	9,367.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4980	0,6202	0,4558	0,5930	0,4507	0,5893
Total	0,8029	1,0000	0,7687	1,0000	0,7648	1,0000

Tabel A.24 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 3% MDEA dan 2% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0578	0,0789	0,0610	0,0894	0,0624	0,0924
HCO ₃ ⁻	0,0595	0,0812	0,0586	0,0858	0,0593	0,0878
K ⁺	0,1157	0,1579	0,1219	0,1787	0,1248	0,1847
MDEA	0,0378	0,0516	0,0378	0,0554	0,0378	0,056
DEA	0,0286	0,0390	0,0286	0,0419	0,0286	0,0423
CO ₂	6,780.10 ⁻⁶	9,254.10 ⁻⁶	6,763.10 ⁻⁶	9,913.10 ⁻⁶	7,308.10 ⁻⁶	1,082.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4333	0,5913	0,3744	0,5488	0,3627	0,5369
Total	0,7327	1,0000	0,6822	1,0000	0,6755	1,0000

Tabel A.25 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 4% MDEA dan 1% DEA dengan Komposisi Gas
CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0578	0,0911	0,0607	0,1005	0,0624	0,1050
HCO ₃ ⁻	0,0593	0,0934	0,0583	0,0965	0,0593	0,0998
K ⁺	0,1157	0,1822	0,1214	0,2009	0,1248	0,2100
MDEA	0,0504	0,0794	0,0504	0,0834	0,0504	0,0848
DEA	0,0143	0,0255	0,0143	0,0236	0,0143	0,0240
CO ₂	6,721.10 ⁻⁶	1,059.10 ⁻⁶	6,760.10 ⁻⁶	0,000	7,255.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,3374	0,5314	0,2993	0,4951	0,2831	0,4764
Total	0,6349	1,0000	0,6044	1,0000	0,5943	1,0000

Tabel A.26 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 5% MDEA dan 0% DEA dengan Komposisi Gas CO₂ 20% N₂ 80%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0581	0,1061	0,0607	0,1005	0,0619	0,1225
HCO ₃ ⁻	0,0590	0,1079	0,0583	0,0965	0,0588	0,1164
K ⁺	0,1162	0,2122	0,1214	0,2009	0,1238	0,2451
MDEA	0,0630	0,1152	0,0504	0,0834	0,0630	0,1247
DEA	0,0000	0,0000	0,0143	0,0236	0,0000	0,0000
CO ₂	6,644.10 ⁻⁶	1,214.10 ⁻⁶	6,695.10 ⁻⁶	0,0000	7,245.10 ⁻⁶	0,0000
H ₂ O	0,2510	0,4586	0,2993	0,4951	0,1977	0,3913
Total	0,5473	1,0000	0,6044	1,0000	0,5053	1,0000

A.2 Perhitungan dengan Persamaan Korelasi E-NRTL

Tahap korelasi ini dilakukan untuk menghitung koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ dengan menggunakan persamaan model E-NRTL. Persamaan model E-NRTL yang digunakan adalah untuk *molekular species* karena H₂O dan CO₂ berbentuk *molekular species*

Berikut contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- Sebagai contoh perhitungan, diambil variabel larutan 30% massa K₂CO₃, dengan 1% massa MDEA dan 4% massa DEA pada suhu 30°C. Contoh perhitungannya sebagai berikut:
Dari eksperimen diperoleh data komposisi (fraksi mol) tiap-tiap komponen di fase liquid yang dapat dilihat pada Tabel A.10

Menghitung C_i, dimana:

C_i = z_i (jumlah muatan) untuk *ionic species*

Tabel A.23 Hasil Perhitungan C_i Untuk 1% MDEA 4% DEA

No.	Spesies	C_i
1.	CO_3^{2-}	-2
2.	HCO_3^-	-1
3.	K^+	1
4.	MDEA	1
5.	DEA	1
6.	CO_2	1
7.	H_2O	1

Menghitung X_i :

Sehingga:

$$\begin{aligned}
 X_{\text{CO}_2} &= C_{\text{CO}_2} \cdot x_{\text{CO}_2} \\
 &= 1 \times 3,994 \cdot 10^{-6} \\
 &= 3,994 \cdot 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{H}_2\text{O}} &= C_{\text{H}_2\text{O}} \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \\
 &= 1 \times 0,630092 \\
 &= 0,630092
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{MDEA}} &= C_{\text{MDEA}} \cdot x_{\text{MDEA}} \\
 &= 1 \times 0,01444 \\
 &= 0,01444
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{DEA}} &= C_{\text{DEA}} \cdot x_{\text{DEA}} \\
 &= 1 \times 0,06545 \\
 &= 0,06545
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{K}^+} &= C_{\text{K}^+} \cdot x_{\text{K}^+} \\
 &= 1 \times 0,15779 \\
 &= 0,15779
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{CO}_3^{2-}} &= C_{\text{CO}_3^{2-}} \cdot x_{\text{CO}_3^{2-}} \\
 &= -2 \times 0,07890 \\
 &= -0,1577902
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{\text{HCO}_3^-} &= C_{\text{HCO}_3^-} \cdot x_{\text{HCO}_3^-} \\
 &= -1 \times 0,05333 \\
 &= -0,05333
 \end{aligned}$$

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara Molekul-Pasangan Ion dan Pasangan Ion-Molekul

Menghitung jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , sebagai berikut :
Sehingga:

$$\begin{aligned}
 Y_{CO_3^{2-}} &= \frac{X_{CO_3^{2-}}}{X_{CO_3^{2-}} + X_{HCO_3^-}} \\
 &= \frac{-0,15779}{-0,15779 + -0,05333} \\
 &= 0,7474 \\
 Y_{HCO_3^-} &= 1 - 0,7474 \\
 &= 0,2526 \\
 Y_{K^+} &= \frac{X_{K^+}}{X_{K^+}} \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

Diketahui *nonrandomness parameter* dari Liu (1999):

Tabel A.24 Data *Nonrandomness Parameter*

Interaksi	α	Harga α
Molekul-Molekul	$\alpha_{m,m'}$	0,2
H ₂ O-Pasangan ion	$\alpha_{H_2O,ca}$	0,2
Pasangan ion-H ₂ O	α_{ca,H_2O}	0,2
MDEA-Pasangan ion	$\alpha_{MDEA,ca}$	0,1
DEA-Pasangan ion	$\alpha_{DEA,ca}$	0,1
CO ₂ - Pasangan ion	$\alpha_{CO_2,ca}$	0,1

Dari hasil fitting diperoleh konstanta *Binary Interaction Parameter* antar molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul seperti pada Tabel A.25 untuk sistem MDEA-DEA

Tabel A.29 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul-Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem MDEA-DEA

Interaksi	A	B
H ₂ O-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	2,205	1581,91566
CO ₃ ⁼ ,H ₂ O-K ⁺	13,866	-376,97854
H ₂ O-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	-8,966	2862,94884
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -H ₂ O	-2,060	-600,94401
CO ₂ -K ⁺ ,CO ₃ ⁼	17,951	0,05165046
CO ₃ ⁼ ,CO ₂ -K ⁺	11,778	0,02136643
CO ₂ -K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	20,708	-0,0029691
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -CO ₂	7,801	0,05282577
MDEA-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	0,275	-0,0212949
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -MDEA	-18,044	0,00998525
MDEA-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	17,250	0,03299855
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -MDEA	-9,171	-0,0135356
DEA-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	-0,663	-0,0084197
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -DEA	-45,931	-0,0208559
DEA-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	21,853	0,00512133
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -DEA	-35,516	-0,0021023

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂:

maka,

molekular

= CO₂

anion

= CO₃⁼,HCO₃⁻

cation

= K⁺

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$T \text{ sistem} = 30,2^{\circ}\text{C} = 303,35 \text{ K}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul adalah :

Menghitung $\tau_{ca,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{CO}_3^{=}-\text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 11,778 ; \quad B = 0,02136643$$

sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,778 + 0,02136643 \left[\frac{1}{303,35(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,778 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^{-}

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{HCO}_3^{-}-\text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 7,801 ; \quad B = 0,05282577$$

Sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 7,801 + 0,05282577 \left[\frac{1}{303,35(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 7,801 \end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO_3^{-2}

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO_2 -pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 17,951$$

$$B = 0,05165046$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 17,951 + 0,05165046 \left[\frac{1}{305,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 17,951\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO_2 -pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 20,708$$

$$B = -0,0029691$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 20,708 + -0,0029691 \left[\frac{1}{303,55(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 20,708\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO_3^{-2}

$$\alpha_{m,ca} = \alpha_{\text{CO}_2,ca}$$

$$= 0,1$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{m,ca} &= \alpha_{\text{CO}_2,ca} \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{c,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{2-}} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = CO}_3^{2-})] \\ &= 0,075\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= 0,025\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{a,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{K^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{K^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $G_{ca,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,1 \times 11,778) \\ &= 0,308 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,1 \times 7,801) \\ &= 0,458 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{c,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{2-}} \times G_{ca,m} \text{ (a = CO}_3^{2-})] \\ &= (0,747 \times 0,308) \\ &= 0,230 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times G_{ca,m} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= (0,253 \times 0,458) \\ &= 0,116 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{a,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\ &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \\ &= 1 \times 0,308 \\ &= 0,308 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}
 G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\
 &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \\
 &= 1 \times 0,458 \\
 &= 0,458
 \end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{c,m}$

$$G = \exp(-\alpha\tau)$$

$$\ln G = -\alpha\tau$$

$$\tau = -\frac{\ln G}{\alpha}$$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned}
 \tau_{c,m} &= -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}} \\
 &= -\frac{\ln(0,230)}{0,075} \\
 &= 19,655
 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}
 \tau_{c,m} &= -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}} \\
 &= -\frac{\ln(0,116)}{0,025} \\
 &= 85,350
 \end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{a,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\tau_{a,m} &= -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}} \\ &= -\frac{\ln(0,308)}{0,1} \\ &= 11,778\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{a,m} &= -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}} \\ &= -\frac{\ln(0,458)}{0,1} \\ &= 7,801\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$

Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm}$$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 27,913\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 136,448\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{ma,ca}$

Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am}$$

Untuk anion (a) CO₃²⁻

$$\begin{aligned}\tau_{ma,ca} &= \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 17,951\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO₃⁻

$$\begin{aligned}\tau_{ma,ca} &= \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 16,807\end{aligned}$$

Menghitung G_{mc,ac}

Untuk anion (a) CO₃²⁻

$$\begin{aligned}G_{mc,ac} &= \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \\ &= 0,124\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO₃⁻

$$\begin{aligned}G_{mc,ac} &= \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \\ &= 0,032\end{aligned}$$

Menghitung G_{ma,ca}

Untuk anion (a) CO₃²⁻

$$\begin{aligned}G_{ma,ca} &= \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \\ &= 0,166\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO₃⁻

$$\begin{aligned}G_{ma,ca} &= \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \\ &= 0,126\end{aligned}$$

Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO_2 tersebut dapat dilihat pada Tabel A.26.

Tabel A.26 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul: CO_2)

Parameter	m = CO_2 , c = K^+	
	a = $\text{CO}_3^{=}$	a = HCO_3^-
Ya	0,747	0,253
Yc	1,000	1,000
$\tau_{ca,m}$	11,778	7,801
$\tau_{m,ca}$	17,951	20,708
$\alpha_{ca,m}$	0,100	0,100
$\alpha_{m,ca}$	0,100	0,100
$\alpha_{c,m}$	0,075	0,025
$\alpha_{a,m}$	0,100	0,100
G _{ca,m}	0,308	0,458
G _{c,m}	0,230	0,116
G _{a,m}	0,308	0,458
$\tau_{c,m}$	19,655	85,350
$\tau_{a,m}$	11,778	7,801
$\tau_{mc,ac}$	27,913	136,448
$\tau_{ma,ca}$	17,951	20,708
G _{mc,ac}	0,124	0,032
G _{ma,ca}	0,166	0,126

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H_2O dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H_2 . Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.27.

Tabel A.27 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:H₂O)

Parameter	m = H ₂ O, c = K ⁺	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻
Y _a	0,747	0,253
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	13,691	-2,340
τ _{m,ca}	2,940	-7,635
α _{ca,m}	0,200	0,200
α _{m,ca}	0,200	0,200
α _{c,m}	0,149	0,051
α _{a,m}	0,200	0,200
G _{ca,m}	0,065	1,597
G _{c,m}	0,048	0,403
G _{a,m}	0,065	1,597
τ _{c,m}	20,266	17,972
τ _{a,m}	13,691	-2,340
τ _{mc,ac}	5,882	-2,989
τ _{ma,ca}	2,940	-7,635
G _{mc,ac}	0,415	1,163
G _{ma,ca}	0,555	4,604

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul MDEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.28 berikut:

Tabel A.28 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:DEA)

Parameter	m = MDEA, c = K ⁺	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻
Y _a	0,747	0,253
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	-45,931	-35,516
τ _{m,ca}	-0,663	21,853
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,075	0,025
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	98,796	34,867
G _{c,m}	73,840	8,808
G _{a,m}	98,796	34,867
τ _{c,m}	-57,558	-86,128
τ _{a,m}	-45,931	-35,516
τ _{mc,ac}	3,009	140,980
τ _{ma,ca}	-0,663	21,853
G _{mc,ac}	0,799	0,028
G _{ma,ca}	1,069	0,112

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.29

Tabel A.29 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:DEA)

Parameter	m = DEA, c = K ⁺	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻
Y _a	0,747	0,253
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	-18,044	-9,171
τ _{m,ca}	0,275	17,250
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,075	0,025
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	6,077	2,502
G _{c,m}	4,542	0,632
G _{a,m}	6,077	2,502
τ _{c,m}	-20,247	18,165
τ _{a,m}	-18,044	-9,171
τ _{mc,ac}	4,264	122,760
τ _{ma,ca}	0,275	17,250
G _{mc,ac}	0,727	0,045
G _{ma,ca}	0,973	0,178

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar Molekul
Diketahui *Binary interaction parameter* dari hasil fitting seperti pada Tabel A.30.

Tabel A.30 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

Interaksi	A	B
H ₂ O-DEA	43,469	-8428,924
DEA-H ₂ O	-4,776	1079,883
N ₂ O-H ₂ O	37,459	-1547,909
H ₂ O-CO ₂	5,732	-1029,979
CO ₂ -DEA	-2,218	-0,011
DEA- CO ₂	-0,001	0,000
CO ₂ -MDEA	110,958	1317,967
MDEA- CO ₂	7,534	-718,052
DEA-MDEA	6,789	0,026
MDEA-DEA	18,796	0,098
H ₂ O-MDEA	4,256	0,015
MDEA-H ₂ O	15,769	0,051

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂:

molekular = CO₂, H₂O, MDEA dan DEA

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$\begin{aligned}
 T \text{ sistem} &= 32^{\circ}\text{C} \\
 &= (30,2^{\circ}\text{C} + 273,15) \text{ K} \\
 &= 303,35 \text{ K}
 \end{aligned}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul adalah :

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk m' CO₂

Binary Interaction Parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\tau_{m,m'} = 0$$

Untuk m' H₂O, m' MDEA, m' DEA

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-molekul yaitu CO₂- H₂O, CO₂-MDEA, CO₂-DEA dengan persamaan berikut:

$$\tau_{m,m'} = A + \frac{B}{T(K)}$$

Menghitung $\alpha_{m,m'}$

Untuk m' CO₂

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' H₂O

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- H₂O:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' MDEA

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- MDEA:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' DEA

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- DEA:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Menghitung G_{m,m'}

Untuk m' CO₂, m' H₂O, m' MDEA, m' DEA

$$G_{m,m'} = \exp(-\alpha_{m,m'} \tau_{m,m'})$$

Binary Interaction Parameter antar molekul untuk molekul H₂O, MDEA dan DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat ditabelkan sebagai berikut:

Tabel A.31 Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

m	m' = CO ₂		m' = H ₂ O		m' = DEA		m' = MDEA	
	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'
CO ₂	0,000	1,000	-0,322	1,066	115,302	0,000	34,676	0,001
H ₂ O	9,007	0,165	0,000	1,000	18,482	0,025	-0,001	1,000
DEA	7,975	0,203	8,425	0,185	0,000	1,000	4,706	0,390
MDEA	1,042	0,812	6,231	0,288	15,769	0,043	0,000	1,000

Menghitung Koefisien Aktivitas H₂O dan CO₂

Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ sebagai berikut :

Menghitung $\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$

$$\begin{aligned}
 \sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} \tau_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} \tau_{H_2O, H_2O} \\
 & + X_{MDEA} G_{MDEA, H_2O} \tau_{MDEA, H_2O} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} \tau_{DEA, H_2O} + \\
 & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} \tau_{CO_3^{2-}, H_2O} + \\
 & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, H_2O} \tau_{HCO_3^-, H_2O} \\
 & + X_{K^+} G_{K^+, H_2O} \tau_{K^+, H_2O}
 \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km}$

$$\begin{aligned}
 \sum_k X_k G_{km} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} + X_{MDEA} G_{MDEA, H_2O} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} + \\
 & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, H_2O} + X_{K^+} G_{K^+, H_2O}
 \end{aligned}$$

$$\text{Menghitung } \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}}$$

Untuk m' = CO₂

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{CO_2} G_{H_2O, CO_2}}{X_{CO_2} G_{CO_2, CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O, CO_2} + X_{MDEA} G_{MDEA, CO_2} + X_{DEA} G_{DEA, CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, CO_2} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, CO_2} + X_{K^+} G_{K^+, CO_2}}$$

Untuk m' = MDEA

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{MDEA} G_{H_2O, MDEA}}{X_{CO_2} G_{CO_2, MDEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, MDEA} + X_{MDEA} G_{MDEA, MDEA} + X_{DEA} G_{DEA, MDEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, MDEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, MDEA} + X_{K^+} G_{K^+, MDEA}}$$

Untuk m' = DEA

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{DEA} G_{H_2O, DEA}}{X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} + X_{MDEA} G_{MDEA, DEA} + X_{DEA} G_{DEA, DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, DEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, DEA} + X_{K^+} G_{K^+, DEA}}$$

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk $m' = \text{CO}_2$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,CO_2}$$

Untuk $m' = \text{MDEA}$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,MDEA}$$

Untuk $m' = \text{DEA}$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,DEA}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km} \tau_{km'}$

Untuk $m' = \text{CO}_2$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km} \tau_{km'} &= X_{CO_2} G_{CO_2,CO_2} \tau_{CO_2,CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O,CO_2} \tau_{H_2O,CO_2} + \\ &\quad X_{MDEA} G_{MDEA,CO_2} \tau_{MDEA,CO_2} + \\ &\quad X_{DEA} G_{DEA,CO_2} \tau_{DEA,CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},CO_2} \tau_{CO_3^{2-},CO_2} + \\ &\quad X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,CO_2} \tau_{HCO_3^-,CO_2} + X_{K^+} G_{K^+,CO_2} \tau_{K^+,CO_2} \end{aligned}$$

Untuk $m' = \text{MDEA}$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km} \tau_{km'} &= X_{CO_2} G_{CO_2,MDEA} \tau_{CO_2,MDEA} + \\ &\quad X_{H_2O} G_{H_2O,MDEA} \tau_{H_2O,MDEA} + \\ &\quad X_{MDEA} G_{MDEA,MDEA} \tau_{MDEA,MDEA} + \\ &\quad X_{DEA} G_{DEA,MDEA} \tau_{DEA,MDEA} + \\ &\quad X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},MDEA} \tau_{CO_3^{2-},MDEA} + \\ &\quad X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,MDEA} \tau_{HCO_3^-,MDEA} + \\ &\quad X_{K^+} G_{K^+,MDEA} \tau_{K^+,MDEA} \end{aligned}$$

Untuk m' = DEA

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} \tau_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} \tau_{H_2O, DEA} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA, DEA} \tau_{MDEA, DEA} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, DEA} \tau_{DEA, DEA} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, DEA} \tau_{CO_3^{2-}, DEA} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, DEA} \tau_{HCO_3^-, DEA} + \\ & X_{K^+} G_{K^+, DEA} \tau_{K^+, DEA}\end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km'}$

Untuk m' = CO₂

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2, CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O, CO_2} + X_{MDEA} G_{MDEA, CO_2} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, CO_2} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, CO_2} \\ & + X_{K^+} G_{K^+, CO_2}\end{aligned}$$

Untuk m' = MDEA

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2, MDEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, MDEA} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA, MDEA} + X_{DEA} G_{DEA, MDEA} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, MDEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, MDEA} + \\ & X_{K^+} G_{K^+, MDEA}\end{aligned}$$

Untuk m' = DEA

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} + X_{MDEA} G_{MDEA, DEA} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, DEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, DEA} \\ & + X_{K^+} G_{K^+, DEA}\end{aligned}$$

$$\text{Menghitung } \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{CO_3^{2-}} X_{K^+} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{MDEA} G_{MDEA-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{HCO_3^-} X_{K^+} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- - K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, HCO_3^- - K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, HCO_3^- - K^+} + X_{MDEA} G_{MDEA-HCO_3^-, HCO_3^- - K^+} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, HCO_3^- - K^+}}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+, HCO_3^- - K^+}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = & X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + \\ & X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{MDEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \end{aligned}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = & X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^- - K^+} \tau_{CO_2-K^+, HCO_3^- - K^+} + \\ & X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- - K^+} \tau_{H_2O-K^+, HCO_3^- - K^+} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-K^+, HCO_3^- - K^+} \tau_{MDEA-K^+, HCO_3^- - K^+} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^- - K^+} \tau_{DEA-K^+, HCO_3^- - K^+}\end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{kc,ac} = & X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-} - K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-} - K^+} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-K^+, CO_3^{2-} - K^+} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-} - K^+} +\end{aligned}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{kc,ac} = & X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^- - K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- - K^+} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-K^+, HCO_3^- - K^+} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^- - K^+} +\end{aligned}$$

$$\text{Menghitung } \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} = \frac{Y_{K^+} X_{CO_3^{2-}} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{MDEA} G_{MDEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} = \frac{Y_{K^+} X_{HCO_3^-} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{MDEA} G_{MDEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}}$$

$$\text{Menghitung } \sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} = X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{MDEA} G_{MDEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{MDEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} = & X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\ & X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{MDEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}\end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{ka,ca}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{ka,ca} = & X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + \\ & X_{MDEA} G_{MDEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}\end{aligned}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\begin{aligned}\sum_k X_k G_{ka,ca} = & X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{MDEA} G_{MDEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \\ & X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\ & X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}\end{aligned}$$

Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dapat dilihat pada Tabel A.33 dan untuk perhitungan koefisien aktivitas CO₂ dapat dilihat pada Tabel A.32.

Tabel A.32 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O

No	Persamaan ENRTL	Hasil hitung		
1a	$\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$	0,332		
1b	$\sum_k X_k G_{km}$	0,567		
1c	1a/1c	0,586		
		m' = CO2	m' = DEA	m' = MDEA
2a	$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}}$	6,54E-06	-1,103E-12	-4,19E-05
2b	$\tau_{m,m'}$	-0,322	115,302	34,676
2c	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	-0,137	111,429	4,1568343
2d	$\sum_k X_k G_{km'}$	3,717	-5,731	-0,335042
2e	2a(2b-(2c/2d))	-1,9E-06	-1,5E-10	-2,0E-03
2f	jumlah 2e	-1,976E-03		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
3a	$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$	0,113	1,59E-02	-
3b	$\tau_{mc,ac}$	5,882	-2,989	-
3c	$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$	1,7	-1,848	-
3d	$\sum_k X_k G_{kc,ac}$	0,3	7,35E-01	-
3e	3a(3b-3c/3d)	5,8E-02	-7,57E-03	-
3f	jumlah 3e	5,057E-02		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
4a	$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$	-0,202	-0,010	-
4b	$\tau_{ma,ca}$	2,940	-7,635	-
4c	$\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$	1,0	-21,943	-

Tabel A.32 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O (lanjutan)

4d	$\sum_k X_k G_{ka,ca}$	0,4	2,911	-
4e	$4a(4b-(4c/4d))$	-1,3E-01	9,82E-04	-
4f	jumlah 4e	-1,337E-01		
5	$\ln \gamma_{H_2O}^{lc} = lc + 2f + 3f + 4f$	0,500461794		
6	$\ln \gamma_{H_2O}^{PHD} = n \gamma_{H_2O}^{Born} = 0$	0,000		
7	γ_{H_2O}	1,649		
8	P H ₂ O	4432,99		

Tabel A.33 Perhitungan Koefisien Aktivitas CO₂

No	Persamaan ENRTL	Hasil hitung		
1a	$\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$	-0,137		
1b	$\sum_k X_k G_{km}$	0,652		
1c	1a/1c	-0,211		
		m' = H ₂ O	m' = DEA	m' = MDEA
2a	$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}}$	0,183	-0,0002834	-0,043104
2b	$\tau_{m,m'}$	0,165	18,482	1,000
2c	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	0,332	111,439	4,1568343
2d	$\sum_k X_k G_{km'}$	0,567	-5,731	-0,335042
2e	$2a(2b-(2c/2d))$	-0,077	-0,0107474	-5,8E-01
2f	jumlah 2e	-0,088		

Tabel A.33 Perhitungan Koefisien Aktivitas CO₂ (lanjutan)

No	Persamaan ENRTL	Hasil hitung		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
3a	$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$	0,034	0,002	-
3b	$\tau_{mc,ac}$	27,913	136,448	-
3c	$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$	0,016	-1,848	-
3d	$\sum_k X_k G_{kc,ac}$	0,324	7,35E-01	-
3e	3a(3b-3c/3d)	0,940	0,236	-
3f	jumlah 3e	1,176		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
4a	$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$	-0,060	-0,002	-
4b	$\tau_{ma,ca}$	17,951	20,708	-
4c	$\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$	1,0	-21,943	-
4d	$\sum_k X_k G_{ka,ca}$	0,4	2,911	-
4e	4a(4b-(4c/4d))	-0,947	-0,065	-
4f	jumlah 4e	-1,012		
5	$\ln \gamma_{CO_2}^{lc} = 1c + 2f + 3f + 4f$	-0,134		
6	$\ln \gamma_{CO_2}^{PHD} = n \gamma_{CO_2}^{Born} = 0$	0,000		
7	γ_{CO_2}	0,874		
8,00	P CO ₂	675,28		